〔新　日　鉄　住　金　技　報　第410号〕　（2018）

UDC 548 . 5 : 517 . 51 : 669 . 14 . 017 . 3

技術論文

高速フーリエ変換を利用した結晶塑性解析

Crystal Plasticity Analysis Using Fast Fourier Transform Numerical Scheme

大　塚　貴　之*　Renald BRENNER　Brigitte BACROIX
Takayuki OTSUKA　Renald BRENNER　Brigitte BACROIX

抄　　録

近年，高速フーリエ変換を利用した弾塑性解析および結晶塑性解析方法が着目されている。高速フーリエ変換を利用した場合，有限要素法のように大規模なマトリクス演算を必要としないため，少ないコンピュータリソースで演算でき，大規模な計算が可能となる。本論文ではこの高速フーリエ変換を利用した結晶塑性解析法について紹介し，鉄鋼材料の相変態時の力学挙動（変態塑性現象）について述べると共に，fcc 金属における平面ひずみ圧縮時に発達する変形集合組織についての計算例について述べる。

Abstract

Crystal plasticity analyses using Fast Fourier Transform (FFT) numerical scheme are now receiving much attention with their computer resource advantages over other numerical methods such as finite element since this method does not require a large matrix solution which obviously takes computational time. In this research, the crystal plasticity using FFT is introduced and then its application to a transformation plasticity analysis will be made. In addition to the transformation plasticity analysis, FFT is used to the calculation of texture development formed by a plane strain compression in an fcc metal and the results will be discussed.

1.　緒　　言

鉄鋼材料の数値解析は，第一原理計算[1]や分子動力学法[2]のような電子・原子レベルのミクロスコピックなものから，境界要素法[3]や有限要素法[4]のようなバルク材の変形を対象としたマクロスコピックな計算力学を用いて様々な現象の数値表現が試みられてきた。前者は原子の運動をダイレクトに扱うものであり，後者は材料の変形を連続体力学の視点から扱うものである。一方で，近年有限要素法を用いた結晶塑性解析が盛んに行われるようになっている[5,6]。これは金属の代表的な変形であるすべり変形について，多結晶体を参照体積要素内での単結晶の構成式の集合体として扱うことにより，結晶粒サイズのいわゆるメゾスコピックな変形表現を可能とした。しかし，有限要素法による結晶塑性解析は，計算負荷が高く，3 次元で十分な結晶粒数を有する多結晶体の変形を計算することは困難であった。

ところで，Moulinec と Suquet は，高速フーリエ変換を用いた弾塑性解析法を提唱し，少ないコンピュータリソースで高精度に数値解析が可能であることを示した[7]。本方法では，高速フーリエ変換を基礎としているため，境界条件が周期的境界条件に限定されるという欠点があるものの，有限要素法のように大規模マトリクスを解く必要が無く，メモリ量や計算速度の点でメリットがある。さらに，Lebensohn は高速フーリエ変換を結晶塑性解析に拡張し，結晶塑性解析においても高速フーリエ変換法が有用であることを示した[8]。

そこで本研究では高速フーリエ変換を用いた結晶塑性解析を考え，そのいくつかの応用例について示す。2. では高速フーリエ変換による結晶塑性解析の定式化を行い，3. でその変態塑性現象への適用例について述べる。次いで 4. では高速フーリエ変換による変形集合組織予測について述べる。

2.　高速フーリエ変換による結晶塑性定式化

周期的境界条件下では，参照体積要素（Representative Volume Element：RVE）内のローカルな位置 $\boldsymbol{x}$ における変位は，RVE 内の平均部分と摂動部分に分けられる。

*　プロセス研究所　鋼圧一貫研究部　主幹研究員　PhD　　千葉県富津市新富 20-1　〒 293-8511

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{u}'(\boldsymbol{x}) + \bar{\varepsilon}\boldsymbol{x} \qquad (1)$$

ここで，$\boldsymbol{u}'(\boldsymbol{x})$ は周期的な摂動変位であり，このときひずみは

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})) = \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}'(\boldsymbol{x})) + \bar{\varepsilon} \qquad (2)$$

となる。ただし，$<\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}'(\boldsymbol{x}))>=0$ であり，< > は RVE 内の体積平均を示す。

一方で，相変態を伴う熱弾塑性構成関係は速度型の式として次式で表すことができる。

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{C}(\boldsymbol{x}):\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{e}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{C}(\boldsymbol{x}):(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{x})-\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{p}(\boldsymbol{x})-\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{th}(\boldsymbol{x})-\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{m}(\boldsymbol{x})) \qquad (3)$$

ただし，$\boldsymbol{C}(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{x}$ における弾性マトリクスであり，$\boldsymbol{\varepsilon}^{e}$，$\boldsymbol{\varepsilon}$，$\boldsymbol{\varepsilon}^{p}$，$\boldsymbol{\varepsilon}^{th}$ と $\boldsymbol{\varepsilon}^{m}$ はそれぞれ，弾性ひずみ，全ひずみ，塑性ひずみ，熱ひずみ，変態ひずみである。ここで，極テンソル $\boldsymbol{\tau}$ を用いて式(3)を書き直すと，

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{C}(\boldsymbol{x}):\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{x}) + \dot{\boldsymbol{\tau}}^{p}(\boldsymbol{x}) + \dot{\boldsymbol{\tau}}^{thm}(\boldsymbol{x}) \qquad (4)$$

ただし，

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}^{p}(\boldsymbol{x}) \equiv -\boldsymbol{C}(\boldsymbol{x}):\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{p}(\boldsymbol{x}) \text{ and } \dot{\boldsymbol{\tau}}^{thm}(\boldsymbol{x}) \equiv -\boldsymbol{C}(\boldsymbol{x}):(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{th}(\boldsymbol{x})+\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{m}(\boldsymbol{x})) \qquad (5)$$

となる。

次に，位置 $\boldsymbol{x}$ に依存しない参照弾性マトリクス $\boldsymbol{C}^{0}$ を導入し，さらに式(4)を書き換えると，

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{C}^{0}:\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{x}) + (\boldsymbol{C}(\boldsymbol{x})-\boldsymbol{C}^{0}):\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{x}) + \dot{\boldsymbol{\tau}}^{p}(\boldsymbol{x}) + \dot{\boldsymbol{\tau}}^{thm}(\boldsymbol{x}) \\ &= \boldsymbol{C}^{0}:\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{x}) + \dot{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{x}) \\ &\qquad \forall x\in V,\ \partial\dot{\boldsymbol{\sigma}}/\partial x = 0 \quad \forall x\in V,\ \dot{u}'\#,\ \dot{\boldsymbol{\sigma}}\cdot n-\#\end{aligned} \qquad (6)$$

となる。ただし，$\dot{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{x})$ は RVE 内の不均質を考慮した極テンソルである。式(6)のフーリエ空間における表現は

$$\hat{\dot{\boldsymbol{\sigma}}}(\xi) = \mathrm{i}\boldsymbol{C}^{0}:(\hat{\dot{\boldsymbol{u}}}'(\xi)\otimes\xi) + \hat{\dot{\boldsymbol{\tau}}}(\xi), \quad \mathrm{i}\hat{\dot{\boldsymbol{\sigma}}}(\xi)\cdot\xi = 0 \qquad (7)$$

である。ただし，ξ は周波数成分であり，イタリック体でない i は虚数である。式(7)から $\hat{\dot{\boldsymbol{\sigma}}}$ を消去すると，以下の式が得られる。

$$\hat{\dot{\boldsymbol{u}}}'(\xi) = \frac{\mathrm{i}}{2}\left(\boldsymbol{N}^{0}\otimes\xi+\xi\otimes\boldsymbol{N}^{0}\right)\hat{\dot{\boldsymbol{\tau}}}(\xi) \qquad (8)$$

ただし，

$$\boldsymbol{N}^{0}(\xi) = \boldsymbol{K}^{0}(\xi)^{-1},\ \boldsymbol{K}^{0}(\xi) = \boldsymbol{C}^{0}:(\xi\otimes\xi) \qquad (9)$$

$$\hat{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}(\xi) = \frac{\mathrm{i}}{2}\left(\xi\otimes\hat{\dot{\boldsymbol{u}}}'(\xi)+\hat{\dot{\boldsymbol{u}}}'(\xi)\otimes\xi\right) = -\hat{\boldsymbol{\Gamma}}^{0}(\xi):\hat{\dot{\boldsymbol{\tau}}}(\xi) \qquad (10)$$

$$\hat{\boldsymbol{\Gamma}}^{0}(\xi) = \frac{1}{4}\left(\boldsymbol{N}^{0}_{li}\xi_{j}\xi_{k}+\boldsymbol{N}^{0}_{ki}\xi_{j}\xi_{l}+\boldsymbol{N}^{0}_{lj}\xi_{i}\xi_{k}+\boldsymbol{N}^{0}_{kj}\xi_{i}\xi_{l}\right) \qquad (11)$$

であり，$\hat{\boldsymbol{\Gamma}}^{0}$ は周期的グリーン作用素である。式(10)のフーリエ逆変換により不均質体におけるひずみ速度分布が得られる。

これらの関係式の解（ひずみ速度分布と応力速度分布）は以下に示す反復計算による数値解法によって得られる。

Initialisation: $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{0} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{n}(\boldsymbol{x}),\ \forall x\in V$

Iteration: $(n+1)$: $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{n}(\boldsymbol{x})$ and $\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{n}(\boldsymbol{x})$ are known

(a) $\hat{\dot{\boldsymbol{\sigma}}}^{n} = FFT(\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{n})$

(b) Check convergence

$$\begin{aligned}e^{n} &= \left|\sqrt{\langle\|\mathrm{div}(\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{n})\|^{2}\rangle} - \sqrt{\langle\|\mathrm{div}(\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{n-1})\|^{2}\rangle}\right| \\ &= \left|\sqrt{\langle\|\xi\cdot\hat{\dot{\boldsymbol{\sigma}}}^{n}(\xi)\|^{2}\rangle} - \sqrt{\langle\|\xi\cdot\hat{\dot{\boldsymbol{\sigma}}}^{n-1}(\xi)\|^{2}\rangle}\right| < \epsilon\end{aligned}$$

and

$$e^{n} = \sqrt{\langle\|\mathrm{div}(\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{n})\|^{2}\rangle} = \sqrt{\langle\|\xi\cdot\hat{\dot{\boldsymbol{\sigma}}}^{n}(\xi)\|^{2}\rangle} < \epsilon$$

if no macroscopic stress is imposed

$$e^{n} = \frac{\sqrt{\langle\|\mathrm{div}(\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{n})\|^{2}\rangle}}{\sqrt{\|\langle\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{n}\rangle\|}} = \frac{\sqrt{\langle\|\xi\cdot\hat{\dot{\boldsymbol{\sigma}}}^{n}(\xi)\|^{2}\rangle}}{\|\hat{\dot{\boldsymbol{\sigma}}}^{n}(0)\|} < \epsilon \quad \text{otherwise}$$

(c) $\hat{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{n+1}(\xi) = \hat{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{n}(\xi) - \hat{\boldsymbol{\Gamma}}^{0}(\xi):\hat{\dot{\boldsymbol{\sigma}}}^{n}(\xi) \quad \forall\xi\neq 0$ and $\hat{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{n+1}(0) = \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}$

(d) $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{n+1} = FFT^{-1}(\hat{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{n+1})$

(e) $\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{n+1}(\boldsymbol{x}) = g(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{n+1}(\boldsymbol{x})) \quad \forall x\in V$

ここで，g は応力ひずみ関係を表す材料固有の関数である。

次に塑性ひずみ速度 $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{p}$ について，結晶塑性による定式化を行う。結晶性金属材料の塑性ひずみは，すべり面におけるすべり方向の変形の帰結として表すことが可能である。このすべり面とすべり方向は結晶構造によってほぼ決定され，この組み合わせをすべり系とよぶ。fcc 金属では 12 のすべり系があり，bcc 金属では 48 の主たるすべり系が存在するとされている。以下では fcc 金属の代表的なすべり系である {111}<110> の 12 個のすべり系を用いる。α すべり系におけるすべり速度を $\dot{\gamma}^{\alpha}$ と書くと，塑性ひずみ速度は全てのすべり系におけるすべり変形の和として次式で示される。

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{p} = \sum_{\alpha}\boldsymbol{p}^{\alpha}\dot{\gamma}^{\alpha} \qquad (12)$$

ただし，$\boldsymbol{p}^{\alpha}$ は α すべり系における Schmid テンソルであり，すべり方向ベクトル $\boldsymbol{s}^{\alpha}$ とすべり面の法線ベクトル $\boldsymbol{m}^{\alpha}$ を用いて，以下で表される。

$$\boldsymbol{p}^{\alpha} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{s}^{\alpha}\otimes\boldsymbol{m}^{\alpha}+\boldsymbol{m}^{\alpha}\otimes\boldsymbol{s}^{\alpha}\right) \qquad (13)$$

すべり面に負荷される分解せん断応力は Schmid 則によって応力テンソルから算出することが可能であるが，この分解せん断応力が弾性限界を超えた場合に塑性変形が発現する，この弾性限界を臨界分解せん断応力（Critical Resolved Shear Stress：CRSS）とよび，g^{α} で表せば，以下の式となる。

$$|\tau^{\alpha}| = |\boldsymbol{p}^{\alpha}:\boldsymbol{\sigma}| = g^{\alpha} \qquad (14)$$

ここで，塑性ひずみ速度の対称性と塑性変形の非圧縮性を考えると，塑性ひずみ速度の自由度は 5 となるため，例えば fcc における 12 のすべり系全てを考えた場合に，ある塑性ひずみ速度 $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{p}$ を達成するための各すべり系におけるすべり速度の組み合わせは無限に存在する不定問題となる。このため，粘塑性型の構成式を用いて（このとき全てのすべり系がすべる）各すべり系におけるすべり量を決定する方法が一般的である [9-12]。

一方で，Hutchinson はひずみ速度非依存型の構成式として，同時にすべるすべり系の数を 5 に限定した場合の解法を示している [9]。すべり面に作用するせん断力の方向を考慮すると，

$$\dot{\tau}^{\alpha} = \mathrm{sgn}(\tau^{\alpha})\dot{g}^{\alpha} \qquad (15)$$

と書くことができ，また微小変形を仮定すると

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}:\boldsymbol{p}^{\alpha}=\sum_{\beta}h^{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{\beta} \tag{16}$$

である。このとき，加工硬化則は以下の式で表すことができる。

$$\dot{g}^{\alpha}=\sum_{\beta}h^{\alpha\beta}|\dot{\gamma}^{\beta}| \tag{17}$$

ここで，$h^{\alpha\beta}$ は加工硬化パラメータであり，パラメータ H_0 と初期降伏せん断応力 τ_0，飽和応力 τ_s を用いて次の式を用いる[13]。

$$h^{\alpha\alpha}=h=H_0\,\mathrm{sech}^2\left[\frac{H_0\Sigma_{\beta}\gamma^{\beta}}{\tau_s-\tau_0}\right] \tag{18}$$

$$h^{\alpha\beta}=qh+(1-q)h\delta_{\alpha\beta} \tag{19}$$

ただし，q は自己硬化と潜在硬化との比であり，通常は 1.0 から 1.4 程度の値をとる。

式(16)を展開すると，

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{\sigma}}:\boldsymbol{p}^{\alpha}&=\boldsymbol{C}:(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}-\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{p}-\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{th}-\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{m}):\boldsymbol{p}^{\alpha}\\&=\boldsymbol{C}:(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}-\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{th}-\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{m}):\boldsymbol{p}^{\alpha}-\sum_{\beta}\boldsymbol{p}^{\alpha}:\boldsymbol{C}:\boldsymbol{p}^{\beta}\dot{\gamma}^{\beta}\\&=\sum_{\beta}h^{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{\beta}\end{aligned} \tag{20}$$

となるため，結局すべり系 α におけるすべり速度が算出可能となる。すなわち，

$$\dot{\gamma}^{\alpha}=\boldsymbol{f}^{\alpha}:(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}-\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{th}-\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{m})\ \text{ with }\ \boldsymbol{f}^{\alpha}=\Sigma_{\beta}Y^{\alpha\beta}\,\boldsymbol{C}:\boldsymbol{p}^{\beta} \tag{21}$$

ただし，

$$Y^{\alpha\beta}=(X^{\alpha\beta})^{-1}\ \text{ and }\ X^{\alpha\beta}=h^{\alpha\beta}+\boldsymbol{p}^{\alpha}:\boldsymbol{C}:\boldsymbol{p}^{\beta} \tag{22}$$

である。

ところで，弾性状態から弾塑性状態へ 1step で移行する場合には，式(21)を直接離散化すると不都合が生じる[14]。これは，当該ステップ初期においては，$|\tau^{\alpha}|<g^{\alpha}$ であるためである。しかし，当該 step 終了時である Δt 後には，弾塑性状態となり，両者は一致している必要があるため，

$$\tau^{\alpha}+\Delta\tau^{\alpha}=\mathrm{sgn}(\tau^{\alpha})(g^{\alpha}+\Delta g^{\alpha}) \tag{23}$$

である。従って，式(16)を増分型で書くと

$$(\boldsymbol{\sigma}+\Delta\boldsymbol{\sigma}):\boldsymbol{p}^{\alpha}=\mathrm{sgn}(\tau^{\alpha})g^{\alpha}+\sum_{\beta}h^{\alpha\beta}\Delta\gamma^{\beta} \tag{24}$$

となり，最終的には以下の式を解くことになる。

$$\Delta\gamma^{\alpha}=\sum_{\beta}Y^{\alpha\beta}\Big(\boldsymbol{\sigma}:\boldsymbol{p}^{\beta}+\boldsymbol{p}^{\beta}:\boldsymbol{C}:(\Delta\boldsymbol{\varepsilon}-\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^{th}-\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^{m})-\mathrm{sgn}(\tau^{\beta})g^{\beta}\Big) \tag{25}$$

step 初期で既に弾塑性状態である場合には，臨界分解せん断応力と負荷応力が一致しているはずなので，式(25)は式(21)に一致する。

3. 変態塑性ひずみ予測

相変態中の鉄鋼材料に応力が負荷されている場合，その応力が当該温度における降伏応力以下の値であっても大きな塑性変形を起こす現象を変態塑性現象とよび，その際に生じるひずみを変態塑性ひずみとよぶ。変態塑性ひずみは熱処理後の残留応力や形状に大きな影響を与えるため，熱処理シミュレーションにおいて本現象の考慮は必須である。Greenwood と Johnson は，変態塑性の発生原因が変態中の体積変化によるひずみの accommodation であるとして，変態塑性ひずみと変態時の体積変化とを関連付けるモデル化を行った[15]。

一方で，Magee は無拡散変態時には負荷応力によってバリアント選択に影響を与えるため変態塑性ひずみが生じるとした[16]。また，Otsuka らは無拡散変態時にも体積膨張が変態塑性ひずみ発生に対して大きな役割を担っていることを示した[17]。Leblond は，Greenwood-Johnson のメカニズムに立脚し，母相（軟質層）のマトリクスから球状の新相（硬質相＝塑性変形しないと仮定）が変態ひずみを伴って生成した際の母相における弾塑性変形を解析的に解き，変態塑性ひずみを定式化した[18]。本研究では，拡散変態時の変態塑性計算を目的とするため，Greenwood-Johnson のメカニズムに立脚する。この場合，変態塑性ひずみは，古典的な弾塑性構成式から導かれるため[19]，有限要素法[20]や上述した高速フーリエ変換[14]による結晶塑性解析の枠組みがそのまま使えることになる。

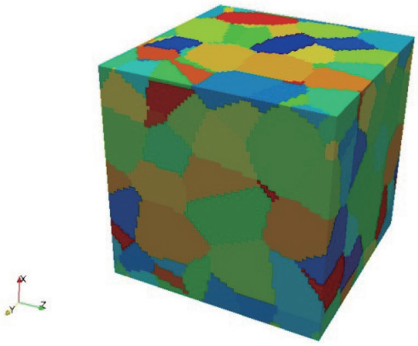
次に，計算対象となる RVE 内を多結晶体に分割することを考える。積分点（あるいは要素）毎に結晶方位を持つ有限要素法とは異なり，高速フーリエ変換による結晶塑性解析では，領域に等間隔に配置した格子点それぞれに結晶方位を与え，各点における応力，ひずみを算出する。これらの格子について，ボロノイ多面体を用いていくつかの結晶粒に分割するが，一つの結晶粒内では共通の初期方位を持つものとする。したがって，異なる初期方位を持つ格子点間に結晶粒界があるものと仮定できる。通常は結晶粒界から変態核が生じるが，本研究では簡単のため，新粒の核は RVE 内からランダムに生じるものと仮定する。また，初期組織に与える結晶方位もランダムに与える。64 × 64 × 64 の格子点中に 100 個の結晶粒を配置した初期組織，およびそこから 100 個の新たな新相が生じた際の例を**図 1** に示す。また，このとき用いたパラメータを**表 1** に示す。

新相は，母相と K-S 関係を満たす結晶方位を持つ核が同時に生じるとし，これらの核は等方的に（球状に）広がるが，相変態を起こした格子点には変態ひずみ $\boldsymbol{\varepsilon}^{m}(\boldsymbol{x})$ が生じる。以下では，RVE 内の平均値をマクロ，各格子点での値をミクロと表現することとする。

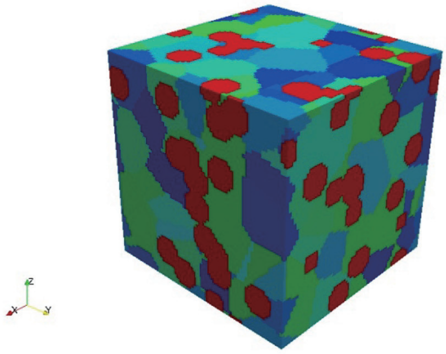
高速フーリエ変換を用いた結晶塑性による相変態解析モデルの妥当性を確認するため，マクロな応力をゼロとした場合，変態開始から終了までのマクロな変態ひずみは，理論上以下の式で表される[21]。

$$\bar{\varepsilon}=\bar{\varepsilon}^{m}=\beta z \tag{26}$$

ただし，$\bar{\varepsilon}$ はマクロなひずみであり，無負荷であるため変態ひずみである $\bar{\varepsilon}^{m}$ と一致し，変態完了までの変態膨張率 β



(a) Initial phase



(b) During phase transformation

図１　ボロノイ多面体分割と新相生成例
（64^3 の立方体格子中に 100 個の粒を埋め込んだ場合）
Sample Voronoi tessellation and phase transformation; 100 grains in 64^3 cubic space

表１　結晶塑性計算に用いるパラメータ
Parameters for crystal plasticity calculation

	Parent phase	Daughter phase
Bulk modulus (GPa)	135 833	150 000
Shear modulus (GPa)	62 692	69 231
H_0 (MPa)	10	550
τ_0 (MPa)	30	100
τ_s (MPa)	40	130
q	1.0	1.0
Number of grains	100	100

をパラメータとした変態率 z との線形関係にある。式(26)が厳密に成り立つためには，材料が等方的である必要があるため，本妥当性の検証計算のみ，結晶方位によらず等方的な弾性定数を用いることとする。

$\beta=1.536\times10^{-3}$ とした場合，数値計算で得られた変態率に応じたマクロなひずみと式(26)から算出されるひずみ（β で規格化）との比較を図２に示す。この結果から，ミクロな変態ひずみの帰結として，変態率と線形にマクロなひずみが生じており，理論式と一致する。

このときの相の分布および母相と新相それぞれにおける塑性ひずみを図３に示す。相変態による変態膨張は，マクロに等方的に膨張するため，一見何も起こっていないように見えるが，実際は母相と新相の界面付近でミクロな変態膨張による塑性変形を生じている（図 3(b)，図 3(c)）。しかし，マクロに等方な材料の場合には，この塑性変形が統計的にあらゆる方向で生じるため，体積変化を伴わない塑性

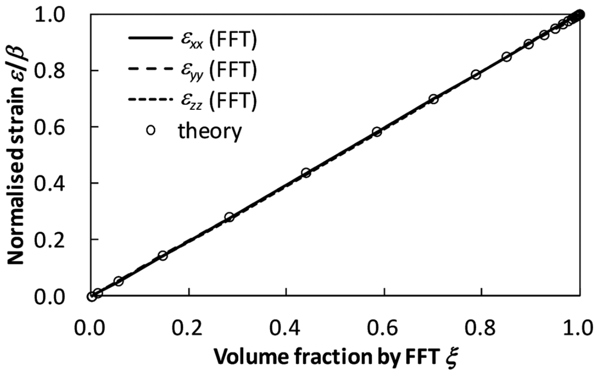
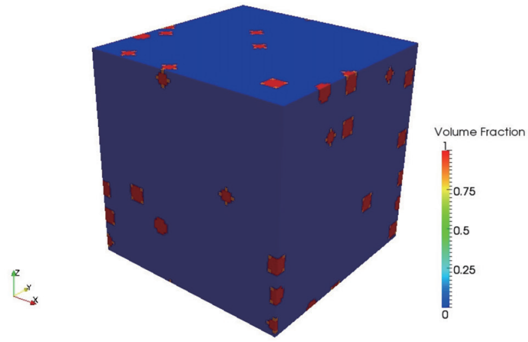
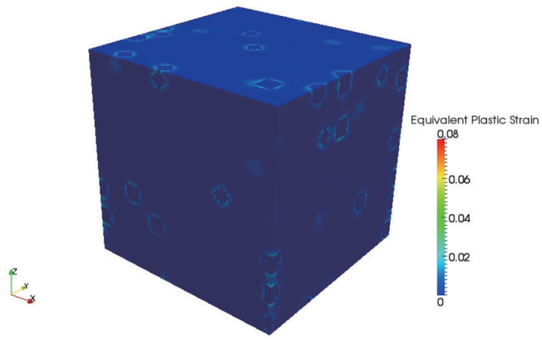


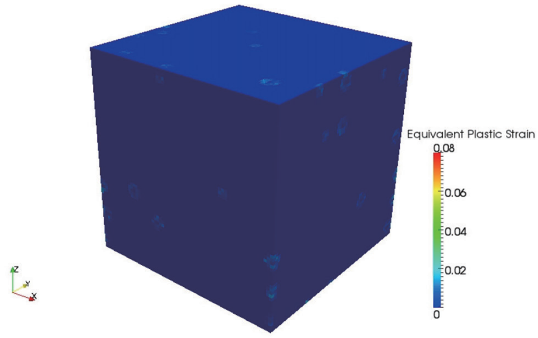
図２　相変態中の平均ひずみ変化
（負荷応力無しで等方多結晶体の場合）
Evolution of the macroscopic strain with the volume fraction of transformed phase (no applied stress, isotropic polycrystal)



(a) Volume fraction

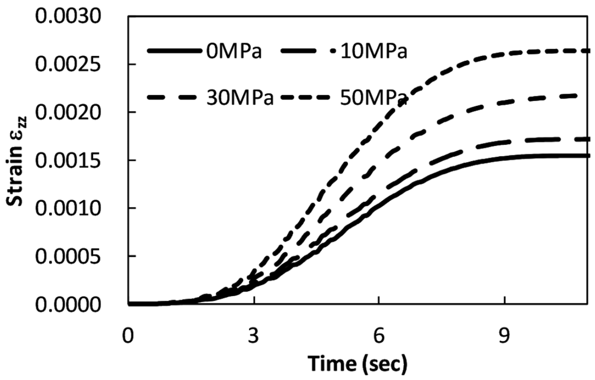


(b) Equivalent plastic strain (mother phase)

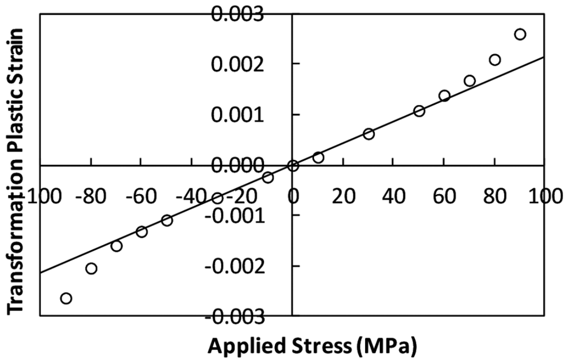


(c) Equivalent plastic strain (daughter phase)

図３　3%変態時の塑性ひずみ分布
Local plastic strain distribution when 3% transformed



(a) Successive strain increase



(b) TP strain versus applied stress

図４　負荷応力と変態塑性ひずみとの関係
Transformation plastic strain under several applied stresses

変形はマクロなひずみとしては生じない。Leblondのモデルでは，新相の塑性変形は無視しているが，表1を用いた数値計算結果からは，新相においても塑性変形を生じている様子が分かる。また，フェライト変態等では，母相よりも新相が軟質であることを考慮する必要もある。

次に，相変態中に一定応力が負荷されていた場合の計算結果について述べる。相変態開始前にRVE内の平均応力が指定の単軸応力（−90～90MPa）となるように引張りあるいは圧縮のひずみを付与し，相変態が終了するまでこの当該応力を保持する。このとき，無負荷～50MPaの負荷応力についてひずみ変化を示したものが図4(a)である。図4(a)から，応力の負荷によって変態終了時のひずみ量が変化していることが分かる。ここで，負荷をかけた場合の変態終了時におけるひずみ（変態終了後除荷）から，無負荷時のひずみを除算すると変態塑性ひずみが得られる。各負荷応力に応じて得られる変態塑性ひずみを図4(b)に示す。この結果から，負荷応力が−50～50MPaの範囲であれば，応力と変態塑性ひずみとにほぼ線形の関係があり，これは文献に示される関係式[15,18,19]と定性関係が一致する。

一方で，負荷応力の絶対値が大きくなると，線形関係から逸脱する。また，この閾値は，母相の降伏応力のおよそ半分の値である。この挙動は文献値と一致する[15,22]。図4(b)の低負荷応力（−50～50MPa）における線形関係から変態塑性係数を算出すると，K_p=2.20×10^{-5}MPa^{-1}となり，Leblondのモデルによる結果K_p=2.17×10^{-5}MPa^{-1}とほぼ一致する結果が得られた。

4.　変形集合組織予測

本セクションでは，高速フーリエ変換および結晶塑性による変形集合組織予測方法と，その平面ひずみ圧縮計算への応用について述べる。材料は変形中に局所的な回転を伴うため，変形集合組織が形成され，異方性等の材質に影響を与える。結晶塑性による変形集合組織の予測は，有限要素法によるもの[23]，高速フーリエ変換によるもの[8]，セルフコンシステント法によるもの[8]等が提案されている。これらの文献では，粘塑性型の構成式が用いられているが，ひずみ速度敏感性指数（以下m値）などのパラメータによる計算結果への影響は明らかでない。そこで，本研究では，このm値を変化させた場合およびひずみ速度非依存型の構成式を用いた場合の平面ひずみ圧縮集合組織に与える影響を調査する。

まず，結晶の回転を考慮した式展開について述べる。ここで，回転を伴うような大変形の解析を行う場合，有限変形理論に基づいた式展開が必要であるが，以下では微小変形理論に則っているため，変形が大きくなった際に厳密解とかい離することが予想される。さらに，高速フーリエ変換では，計算格子点が不動のため，実際には何らかの方法での補完が各ステップで必要になるが[8]，本研究では簡単のため格子点は不動と仮定した。

結晶の回転は，スピンテンソルを用いて計算する。すなわち，各ステップでのすべり方向，すべり面およびオイラー角変化は，速度こう配の弾塑性分解

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}^{*}+\boldsymbol{L}^{p} \tag{27}$$

を考えると，弾性スピン$\boldsymbol{W}^{*}$を用いて，以下のように表される。

$$\dot{\boldsymbol{s}}=\boldsymbol{W}^{*}\boldsymbol{s},\quad \dot{\boldsymbol{m}}=\boldsymbol{W}^{*}\boldsymbol{m} \tag{28}$$

$$\dot{\varphi}_1=-(W^{*}_{23}\sin\varphi_1-W^{*}_{31}\cos\varphi_1)\cot\phi+W^{*}_{12}$$

$$\dot{\phi}=W^{*}_{31}\sin\varphi_1+W^{*}_{23}\cos\varphi_1$$

$$\dot{\varphi}_2=\frac{W^{*}_{23}\sin\varphi_1-W^{*}_{31}\cos\varphi_1}{\sin\phi} \tag{29}$$

ただし，オイラー角はBunge表記である。弾性スピンは，弾性速度こう配テンソルの反対称成分である。

$$\boldsymbol{W}^{*}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{L}^{*}-\boldsymbol{L}^{*T}) \tag{30}$$

塑性スピンは，

$$\boldsymbol{w}^{\alpha}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{s}^{\alpha}\otimes\boldsymbol{m}^{\alpha}-\boldsymbol{m}^{\alpha}\otimes\boldsymbol{s}^{\alpha}) \tag{31}$$

を用いれば，

$$\boldsymbol{W}^{p}=\sum_{\alpha}\boldsymbol{w}^{\alpha}\dot{\gamma}^{\alpha} \tag{32}$$

と表すことができるので，スピンが求まれば弾性スピンも

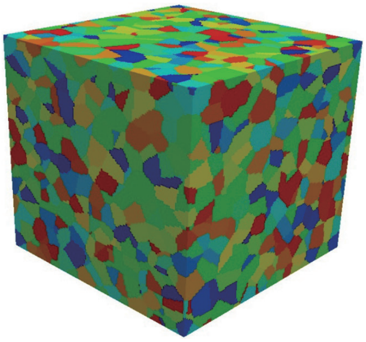


図５　ボロノイ多面体分割
（128³ の立方体格子中に 2000 個の粒を埋め込んだ場合）
Voronoi tessellation (2000 grains in 128³ cubic space)

容易に計算することができる。式(10)，(11)と同様に，極テンソルを用いれば，スピンテンソルのフーリエ空間表記

$$\hat{W}(\xi) = \frac{1}{4}\left(\xi\otimes\hat{u}'(\xi) - \hat{u}'(\xi)\otimes\xi\right) = -\hat{\Gamma}'^{0}(\xi):\hat{\tau}(\xi) \qquad (33)$$

$$\hat{\Gamma}'^{0}(\xi) = \frac{1}{4}\left(-N^{0}_{li}\xi_j\xi_k + N^{0}_{ki}\xi_j\xi_l - N^{0}_{lj}\xi_i\xi_k + N^{0}_{kj}\xi_i\xi_l\right) \qquad (34)$$

から求めることが可能である。この場合，極テンソルそのものを計算する必要がある。粘塑性型の結晶塑性モデルとしては，ひずみ速度敏感性指数 m を用いて，下記の式を用いる[9-12]。

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0\left(\frac{\tau^{\alpha}}{g^{\alpha}}\right)\left|\frac{\tau^{\alpha}}{g^{\alpha}}\right|^{\frac{1}{m}-1} \qquad (35)$$

この場合，すべてのすべり系が活動することになるが，m 値が十分小さい場合には，ひずみ速度非依存の構成式に近づく。

以上の式を用いて，128³ 個の格子点から成る RVE 内に 2000 個の結晶粒を配置し（図５），平面ひずみ圧縮時の変形集合組織計算を実施する。初期方位として，2000 個の結晶粒にランダムな結晶方位を与え，y 方向（幅方向）の平均ひずみを 0 とし，z 方向に 30％の圧縮ひずみを加えた場合の集合組織について以下で述べる。

式(35)における m 値を 0.05 から 0.5 まで変化させた場合の ODF（φ_2=45°）を図６(a)～(e)に，式(21)で計算した場合の ODF を図６(f)に示す。これらの結果から，何れの条件においても，Copper 方位および Brass 方位が発達した典型的な板厚中心の圧延集合組織が得られている。これは，圧延による板厚中心部のひずみは，平面ひずみ圧縮状態に近いためである。

一方で，m 値に応じて集合組織の発達に変化がみられる。m 値が 0.05 の場合，全体的に集合組織が弱いが，Copper 方位が Brass 方位に比べて強度が高い。また，m 値が上がるに従い，Brass 方位の強度が高くなり，逆に Copper 方位の強度が弱くなる傾向にある。ひずみ速度非依存型の構成式を用いた場合には，m 値が小さい場合のように，Copper 方位の強度が Brass 方位よりも強くなっている。これは，m 値が小さいとひずみ速度依存が小さくなるという式(35)の

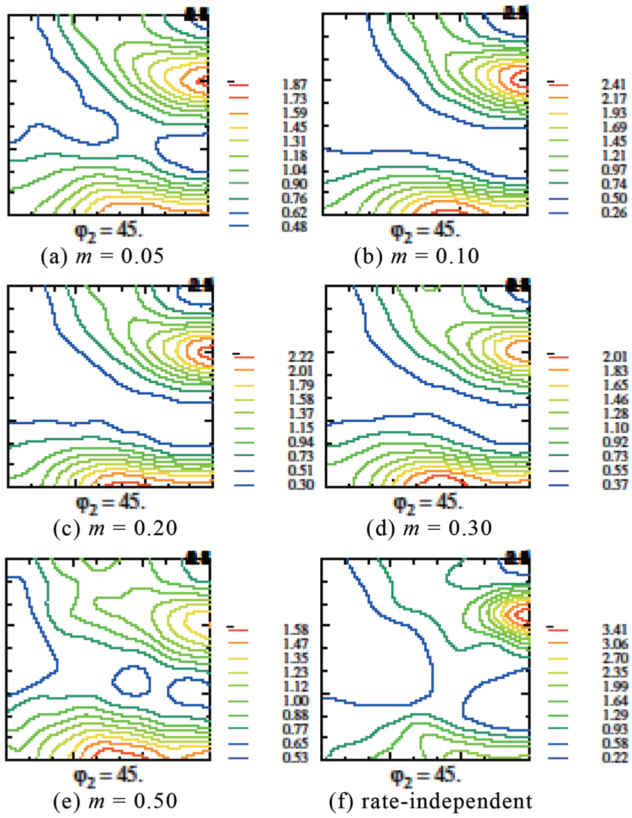


図６　集合組織（φ_2=45°）に与えるひずみ速度敏感性指数の影響
Strain rate sensitivity exponent dependence on ODF (φ_2=45°)

構成式の特徴に合致する（$m\rightarrow 0$ でひずみ速度依存無し）。この m 値の変化は材料の温度依存性と読み替えることも可能であるが（m 値小で低温，m 値大で高温），m 値の変化による加工硬化挙動と集合組織形成との関連性は，積層欠陥エネルギーの影響と定性的に一致しており関連性が考えられる。

5．結　　言

高速フーリエ変換を用いた結晶塑性解析方法を示し，その変態塑性解析および集合組織解析への適用について述べた。高速フーリエ変換を用いた結晶塑性解析手法は，有限要素法によるものと比べて，周期境界条件に限定されるものの，非常に少ない計算リソースでの演算が可能であり，大規模解析が可能である。

本手法を用いた変態塑性の解析では，数値計算から変態塑性ひずみを数値予測することが可能となり，Leblond の解析モデルと結果が一致した。また，高応力下における変態塑性ひずみの非線形性も，単結晶の弾塑性構成式から自然な形で算出することができた。

さらに，本手法は変形集合組織の計算にも応用可能であり，30％平面ひずみ圧縮時の集合組織予測を実施しひずみ速度敏感性指数（m 値）が集合組織形成に与える影響を考察した。その結果，m 値が小さい場合およびひずみ速度非

依存型の構成式を用いた場合には，Copper 方位の強度が高く，Brass 方位が低い強度となり，*m* 値が高い（ひずみ速度に敏感）場合には，Brass 方位の強度が高く，Copper 方位の強度が低下することが分かった。

参照文献

1) 澤田英明，川上和人，杉山昌章：第一原理計算による α-Fe 中の置換型元素と侵入型元素の相互作用．日本金属学会誌．68 (12)，977-982 (2004)
2) 上原拓也，井上達雄：溶融・凝固過程における相変態，温度および応力の分子動力学シミュレーション．日本機械学会論文集 A 編．63 (614)，2135-2141 (1997)
3) 木原諄二，相澤龍彦：境界要素法の二次元弾性問題への応用．鉄と鋼．67 (6)，720-725 (1981)
4) 河西大輔，古森愛美，石井篤，山田健二，小川茂：片駆動圧延における板材の反り挙動とその機構．鉄と鋼．101 (6)，319-328 (2015)
5) 大橋鉄也：結晶の塑性すべりと転位蓄積の解析へのメゾスケールアプローチ．日本機械学会論文集 A 編．68 (675)，1490-1497 (2002)
6) Kuroda, K., Tvergaard, V.: Shear Band Development Predicted by a Non-normality Theory of Plasticity and Comparison to Crystal Plasticity Predictions. Int. J. Solids and Structures. 38 (50-51), 8945-8960 (2001)
7) Moulinec, H., Suquet, P.: A Numerical Method for Computing the Overall Response of Nonlinear Composites with Complex Microstructure. Comp. Methods Appl. Mech. Eng. 157 (1-2), 69-94 (1998)
8) Lebensohn, R.A.: N-site Modelling of a 3D Viscoplastic Polycrystal Using Fast Fourier Transform. Acta Materialia. 49 (14), 2723-2737 (2001)
9) Hutchinson, J.W.: Bounds and Self-consistent Estimates for Creep of Polycrystalline Materials. Proc. R. Soc. Lond. Ser. A. A348, 101 (1976)
10) Pan, J., Rice, J.R.: Rate Sensitivity of Plastic Flow and Implications for Yield-surface Vertices. Int. J. Solids Struct. 18, 973 (1983)
11) Peirce, D., Asaro, R.J., Needleman, A.: Material Rate Dependence and Localized Deformation in Crystalline Solids. Acta Metall. 31 (12), 1951 (1983)
12) Asaro, R.J., Needleman, A.: Texture Development and Strain Hardening in Rate Dependent Polycrystals. Acta Metall. 33 (6), 923 (1985)
13) Peirce, D., Asaro, R.J., Needleman, A.: An Analysis of Nonuniform and Localized Deformation in Ductile Single Crystals. Acta Metall. 30 (6), 1087 (1982)
14) Otsuka, T., Brenner, R., Bacroix, B.: FFT-based Modelling of Transformation Plasticity in Polycrystalline Materials During Diffusive Phase Transformation. Int. J. Eng. Sci. 127C, 92-113 (2018)
15) Greenwood, G.W., Johnson, R.H.: The Deformation of Metals under Small Stresses During Phase Transformations. Proc. Roy. Soc. London. A283, 403 (1965)
16) Magee, C.L.: PhD Thesis. Transformation Kinetics, Microplasticity and Aging of Martensite in Fe-31Ni. Carnegie Institute of Technologie University Pittsburgh, PA, 1966
17) Otsuka, T., Akashi, T., Ogawa, S., Imai, T., Egami, A.: Effect of Volume Expansionon Transformation Plasticity during Ferrite and Martensite Transformation of Steel. J. of the Soc. of Mater. Sci. Japan. 60 (10), 937 (2011)
18) Leblond, J.B., Devaux, J., Devaux, J.C.: Mathematical Modelling of Transformation Plasticity in Steels I: Case of Ideal Plastic Phases. Int. J. Plasticity. 5, 573 (1989)
19) 井上達雄：統合型変態・熱塑性構成式理論とその応用．材料．56 (4)，352 (2007)
20) Barbe, F., Quey, R.: Int. J. Plasticity. 27 (6), 823 (2011)
21) Leblond, J.B., Mottet, G., Devaux, J.C.: A Theoretical and Numerical Approach to the Plastic Behaviour of Steels during Phase Transformations–I. Derivation of General Relations. J. Mech. Phys. Solids. 34 (4), 395 (1986)
22) Videau, G.C., Cailletaud, G., Pineau, A.: Experimental Study of the Transformation-Induced Plasticity in a Cr-Ni-Mo-Al-Ti Steel. J. Phys. IV France, 6 (C1), 465 (1996)
23) 本橋元，影沢豊彦，髙橋寛，土田信：有限要素多結晶モデルによる塑性変形解析．日本機械学会論文集 A 編．61 (582)，353 (1995-2)

大塚貴之　Takayuki OTSUKA
プロセス研究所　鋼圧一貫研究部
主幹研究員　PhD
千葉県富津市新富20-1　〒293-8511

Renald BRENNER
Research Director, PhD
L'Institut Jean le Rond d'Alembert
Université Pierre et Marie Curie

Brigitte BACROIX
CNRS Research Director, PhD
Laboratoire des Sciences des Procédés et des Matériaux
Université Paris 13