

## 主 論 文 要 旨

報告番号	甲 第 号	氏 名	上田 亮
主論文題目： Mg 基 LPSO 相におけるキンク帯形成に関する高次応力を考慮した 転位-結晶塑性 FEM 解析			
(内容の要旨) <p>長周期積層構造(LPSO: Long-Period Stacking Ordered)相を強化相とするマグネシウム合金は軽量、高強度、高耐熱性などの優れた特性を有するため、この合金を輸送機器の構造材料に使用することは地球温暖化対策の有力な一手法になり得ると言われている。特に LPSO 相におけるキンク帯形成は材料強化の主因と考えられており、その形成機構の解明に期待が寄せられている。しかしながら、従来の転位-結晶塑性モデルに基づいたキンク帯形成に関する FEM 解析では、解析結果に顕著なメッシュ依存性が現れるため、キンク帯におけるすべりや方位などの諸量を定量的に評価するうえで望ましくない。これに対して、ひずみこう配にエネルギー共役な高次応力を考慮した理論では、構成式に物質点近傍の非局所性が導入されるため変形のメッシュ依存性が軽減される。そこで本研究では、高次応力を考慮した転位-結晶塑性モデルを構築し、LPSO 相におけるキンク帯形成のマルチスケール FEM 解析を実施することで、本モデルの妥当性および有用性を示すことを試みている。</p> <p>第 1 章は緒言であり、本研究の社会的背景および本論文の意義について述べている。</p> <p>第 2 章では、金属材料の大変形状態を記述するために配置の概念を導入し、各配置におけるひずみを定義している。また、結晶塑性論における諸量の配置変換則を与えている。さらに、材料内に蓄積した転位密度の結晶塑性論的表現方法を紹介し、GN(Geometrically Necessary)転位密度および SS(Statistically Stored)転位密度の発展式をそれぞれすべり速度こう配およびすべり速度に対応する量として定義している。</p> <p>第 3 章では、高次応力を GN 転位密度に共役な力として全自由エネルギーに導入している。また、仮想仕事の原理に基づいて高次理論に関連する各種保存則を導出し、釣合い方程式から高次応力の発散が背応力になることを示している。また、Clausius-Duhem の不等式から応力および高次応力の構成式の一般形を導くとともに、それらの構成式に対する熱力学的制限について述べている。</p> <p>第 4 章では、速度形の弾粘塑性構成式および高次応力の構成式を熱力学的に導出している。その際、高次応力には GN 転位の分布に関連した特性長が含まれることを示している。また、SS 転位密度の表現をすべり面の曲率依存形に拡張することで従来の転位-結晶塑性論における硬化則を高次理論に適する形に修正している。さらに、本モデルに対する従来の転位-結晶塑性モデルの位置づけを説明している。</p> <p>第 5 章では、3 章で示した仮想仕事の原理を速度形に拡張している。また、高次理論において新たに導入される境界条件について言及し、高次応力に対する境界条件が GN 転位密度の境界条件に対応することを述べている。</p> <p>第 6 章では、有限要素法による数値解析を行うために 5 章で導出した仮想仕事の原理を離散化している。加えて、数値計算の低コスト化・安定化を実現するための手法を導入している。</p> <p>第 7 章では、本モデルを用いた Mg 基 LPSO 相に対する FEM 解析の結果およびそれに対する考察について述べている。まず、キンク変形が生じやすい初期方位を設定した短冊状の単結晶に対する解析を行い、キンク帯形成のメッシュ依存性を特性長と試験片寸法比(スケール比)の観点から検討している。そして、高次応力の導入によるキンク帯形成過程について議論するとともに、キンク帯の幅が特性長に応じて変化することを示している。また、本モデルにより寸法効果を表現可能なことを明らかにしている。続いて多結晶に対する解析を実施し、結晶粒界におけるすべり速度の境界条件が変形に及ぼす影響を GN 転位蓄積およびそれにともなう背応力場形成に基づいて検討している。また、粒界における非底面系の活動にも言及している。最後に、キンク帯を特徴づける回位四重極構造の表現方法について述べ、すべりの不適合度を用いて回位密度分布を簡易的に表現できることを示している。</p> <p>第 8 章は結言であり、構築したモデルの性質および FEM 解析から得た知見を要約している。</p>			

**SUMMARY OF Ph.D. DISSERTATION**

School Integrated Design Engineering	Student Identification Number	SURNAME, Given name UETA, Ryo
Title Dislocation-based Crystal Plasticity FE Analysis for Kink Band Formation in Mg-based LPSO Phase Considering Higher-order Stress		
Abstract <p>Magnesium alloys including a Long-Period Stacking Ordered (LPSO) phase have some excellent properties such as light weight, high strength and high heat resistance, and are expected to be used in structural materials of transportation equipment as a prevention measure of the global warming problem. Since, kink band formation in the LPSO phase strengthens the alloys, it is extremely important to clarify the formation mechanisms of kink band. However, the results of FE analyses for the kink band formation based on the conventional dislocation-based crystal plasticity model show the mesh dependence and such numerical property is not desirable in quantitative evaluation of slip and crystal orientation in the kink band. On the other hand, in the theory considering higher-order stress conjugate to the strain gradient, the mesh dependence is reduced because nonlocal information around a material point is introduced into the constitutive law. In the present thesis, a dislocation-based crystal plasticity model considering higher-order stress is developed and the multiscale FE analysis is performed to verify the validity and the capability of the present model.</p> <p>Chapter 1 is an introduction and explains the background and aims of this study.</p> <p>In chapter 2, kinematics for large deformation of materials and the concept of crystal plasticity theory are described. In addition, the definitions of GN (Geometrically Necessary) dislocation density and SS (Statistically Stored) dislocation density related to the slip gradient and the slip respectively are given.</p> <p>Chapter 3 provides various conservation laws in higher-order theory on the basis of the principle of virtual power. The higher-order stress is incorporated to the total free energy and its divergence is expressed as back stress. The general forms of constitutive law for stress and higher-order stress are derived in thermodynamic framework.</p> <p>Chapter 4 gives rate form of the constitutive equations of elastoviscoplasticity and a higher-order stress. The higher-order stress involves an intrinsic length scale associated with the area in which the GN dislocations distribute and the conventional hardening rule is modified by extending a representation of the SS dislocation density to that depending on the curvature of slip plane. Moreover, the relationship between the conventional model and the higher-order stress one is investigated.</p> <p>In chapters 5 and 6, the principle of virtual power is extended to the rate form and discretized on the basis of FEM. The boundary conditions for slip rate and higher-order stress, which are newly introduced is described in detail and the correlation between the boundary condition for higher-order stress and GN dislocation density is clarified.</p> <p>Chapter 7 shows the results of FE analyses for the LPSO phase. The mesh dependence for the kink band formation in single crystal is discussed from the view point of size effect defined as a ratio of the intrinsic length scale to the specimen size. The relationship between the intrinsic length scale and the width of the kink band is also referred and it is shown that the present model can express the size dependence of materials. In analyses for polycrystals of LPSO phase, the effects of additional boundary condition for slip rate on the grain boundaries are discussed through the GN dislocation pile-up and the activity of non-basal slips. Furthermore, the method to depict a disclination quadrupole using the incompatibility of slip is mentioned.</p> <p>Chapter 8 summarizes the conclusions obtained in this study.</p>		

学位論文 博士(工学)

Mg基LPSO相におけるキンク帯形成に関する  
高次応力を考慮した転位-結晶塑性FEM解析

2015年度

慶應義塾大学大学院理工学研究科

上田 亮

# 目次

<b>1章</b>	<b>緒言</b>	<b>1</b>
1.1	本研究の背景	1
1.1.1	数値シミュレーションと次世代マグネシウム合金	1
1.1.2	LPSO型Mg合金の特徴	2
1.2	LPSO相に対する数値解析例	18
1.3	従来の数値解析における問題点	18
1.4	高次理論の適用と寸法効果の表現	19
1.5	本研究の目的	20
1.6	本論文の構成	21
1.7	本論文で用いる記号	23
<b>2章</b>	<b>運動学</b>	<b>24</b>
2.1	4配置構成による変形こう配の分解	24
2.2	ひずみの弾塑性分解	28
2.2.1	ひずみの定義	28
2.2.2	ひずみの配置変換則	29
2.3	速度こう配の弾塑性分解	30
2.3.1	速度こう配の定義	30
2.3.2	変形速度の配置変換則	31
2.3.3	スピンの配置変換則	32
2.4	ひずみ速度	32
2.4.1	弾性ひずみ速度	32
2.4.2	塑性ひずみ速度	33
2.5	ひずみ速度と変形速度	34
2.5.1	金属材料における微小弾性変形の仮定	34
2.5.2	ひずみ速度と変形速度の関係	35
2.5.3	ひずみ尺度と変形尺度	36
2.6	結晶塑性論における塑性変形の記述	36
2.6.1	塑性速度こう配の定義	36
2.6.2	塑性変形速度と塑性スピン	37
2.7	転位密度の表現	38



2.7.1	2種類の転位密度	39
2.7.2	GN転位密度とGN転位ドリフト速度	41
2.7.3	SS転位密度	47
<b>3章</b>	<b>保存則と材料の変形に対する熱力学</b>	<b>49</b>
3.1	熱力学的力の定義	49
3.2	各種保存則とエントロピー増大則	50
3.2.1	質量保存則	51
3.2.2	力学的保存則と境界条件	51
3.2.3	エネルギー保存則	55
3.2.4	エントロピー増大則	56
3.3	Clausius-Duhemの不等式	56
3.4	保存部分の熱力学的制限	57
3.5	散逸部分の熱力学的制限	58
<b>4章</b>	<b>構成式と硬化則</b>	<b>61</b>
4.1	弾塑性構成式	61
4.1.1	速度形弾性構成式	61
4.1.2	結晶塑性論における速度形弾塑性構成式	62
4.2	高次応力の構成式	63
4.2.1	結晶塑性論における速度形構成式	63
4.2.2	未定乗数 $\lambda$ の決定	64
4.3	硬化則	66
4.3.1	すべり速度硬化則	66
4.3.2	流れ応力の発展式	67
4.4	速度形弾・粘塑性構成式	70
4.5	活動すべり系の選択	70
<b>5章</b>	<b>速度形仮想仕事の原理</b>	<b>71</b>
5.1	高次理論における速度形仮想仕事の原理	71
5.2	高次量に対する境界条件	74
5.3	従来 of 理論における速度形仮想仕事の原理	76
<b>6章</b>	<b>FEM解析のための定式化</b>	<b>78</b>
6.1	有効応力増分の線形化	78
6.2	速度形仮想仕事の原理のマトリクス表示	81
6.3	支配方程式の離散化	83
6.3.1	形状関数による離散化および剛性方程式	83
6.3.2	Gauss求積法	88
6.3.3	結晶基底の更新	89

6.4	$r_{\min}$ 法による増分値の修正 . . . . .	89
6.4.1	$r_{\min}$ 法 . . . . .	90
6.4.2	比 $r^{(a)}$ の定め方 . . . . .	90
<b>7 章</b>	<b>FEM 解析結果と考察</b> . . . . .	<b>91</b>
7.1	キンク帯の表現 . . . . .	91
7.2	LPSO 相単結晶に対する二次元 FEM 解析 . . . . .	92
7.2.1	キンク帯形成のメッシュ依存性 . . . . .	92
7.2.2	キンク帯形成におけるスケール比の影響 . . . . .	112
7.2.3	キンク帯形成における寸法効果 . . . . .	118
7.3	LPSO 相多結晶に対する二次元 FEM 解析 . . . . .	127
7.4	回位四重極の表現 . . . . .	135
<b>8 章</b>	<b>結言</b> . . . . .	<b>140</b>
8.1	本論文の結言 . . . . .	140
8.2	今後の課題と展開 . . . . .	141
8.2.1	特性長とキンク帯幅の関係および LPSO 相の特性長の同定 . . . . .	141
8.2.2	多結晶における粒界の境界条件とキンク変形 . . . . .	141
8.2.3	二相合金への応用 . . . . .	141
	謝辞 . . . . .	142
	参考文献 . . . . .	144
	本研究に関する原著論文および口頭発表 . . . . .	152
<b>補足 A</b>	<b>2 章の補足</b> . . . . .	<b>154</b>
A.1	ベクトルおよびテンソルの共回転速度 . . . . .	154
A.2	各配置におけるひずみの定義 . . . . .	155
A.3	GN 転位テンソルの別表現 . . . . .	156
A.4	各配置における GN 転位テンソル . . . . .	156
A.5	GN 転位テンソルの物質時間微分 . . . . .	157
A.6	各配置における GN 転位ドリフト速度 . . . . .	158
A.7	SS 転位密度の導出 . . . . .	160
<b>補足 B</b>	<b>4 章の補足</b> . . . . .	<b>163</b>
B.1	異方性弾性係数 . . . . .	163
B.2	高次応力の速度形構成式の導出 . . . . .	164
B.3	転位論に基づく背応力の導出 . . . . .	164
<b>補足 C</b>	<b>6 章の補足</b> . . . . .	<b>168</b>
C.1	高次モデルの別解法 (1) . . . . .	168

補足 D 7章の補足	171
D.1 メッシュ依存性に関する要素の選択	171
D.2 高次モデルの別解法 (2)	173
D.3 双晶変形を無視した二相合金に対する FEM 解析	176

# 1章

## 緒言

### 1.1 本研究の背景

#### 1.1.1 数値シミュレーションと次世代マグネシウム合金

近年、地球環境問題に対する配慮やコスト削減の観点から、多くの企業では製品開発において省エネルギー化の要請が高まっている。そこで、試作品を用いた試験等に費やされていた膨大な製品開発期間および開発費用の削減が要望されており、その有力な候補として材料の種々の挙動に関する数値シミュレーションが注目されている。しかしながら、従来の連続体力学に基づく大変形解析では、実験結果から同定した硬化曲線を用いる巨視的手法のみが採用されており、数値解析に使用する数値モデルの精密化を図ると構成則の複雑化ならびに実験に依存する材料定数の増加を招くという問題を有する。この問題を解決するために、材料の微視的情報と巨視的挙動を連成したマルチスケールモデリングが提案され、近年その工業的利用が盛んに模索されている。ここで、材料の微視的構造に注目すると金属は金属結晶の集まりであり、材料強度や加工硬化など力学的性質を支配するのはそれらに含まれる結晶欠陥である転位とわかる。すなわち、金属の変形挙動を微視的に捉えた場合、その素過程は転位運動ならびに転位蓄積であるといえる。この微視的情報である転位を考慮し、ボトムアップ的に対象とする材料に適したモデルを構築することで、前述の問題を解決することが期待されている。

一方、エネルギー問題や環境問題対策の観点から、高強度かつ軽量である構造材料の研究開発が半世紀以上にわたって行われてきた。そして、近年特に企業や研究者の注目を集めている軽金属材料がマグネシウム (Mg) である。Mg は構造用金属材料のなかで最軽量であり、その重量は同じく軽金属であるアルミニウム (Al) の 60~70% である<sup>(1)~(4)</sup>。軽さにおける優位性は然ることながら強度の面では Al と同程度の比強度を有しており、また振動吸収性や防電磁性に優れるなど多くの有用な性質がある<sup>(1)~(4)</sup>。さらに、これらの優良な力学的性質に加えて、Mg は天然資源が豊富でありリサイクル性が高く、かつ人体に対して無害であるため低コスト性および環境親和性という観点からみても優れた材料であるといえる<sup>(1)~(3)</sup>。しかしながら、一方で Mg は脆性材料であるため加工性に乏しく、その工業的な用途は限定されてきた。ここで、Mg が脆化傾向を示す主たる原因は、その結晶構造が六方最密充填 (HCP: hexagonal close-packed) 構造をとることにある。Mg は HCP 構造を有するために常温で活動するすべり系が 1 つしか存在せず、変形の異方性が極めて強

い。そのため、現在一般的に使用されている構造材料と比較して脆い材料とされており、Mgの工業的利用にはその改善が必要不可欠となる。

電子構造的にみると、Mgは添加元素によって力学的・化学的性質が大きく変化するという性質を有する<sup>(5)</sup>。そこで、Mgに延性を付加することを目的として様々な添加元素による合金化が進められ、Mgへの最適な添加元素に関する研究が古くから行われてきた。これまでに、Mgに少量のAlや亜鉛(Zn)またはイットリウム(Y)などの希土類金属(RE:レアアース)を添加するとその力学的性質が劇的に向上することが知られており<sup>(1)~(3)(6)</sup>、Luo-Zhang<sup>(7)</sup>はMg-Zn-Zr-Y合金中に発現するMg<sub>12</sub>ZnY相が結晶構造学的に新規な長周期積層(LPSO: long-period stacking ordered)構造を有すると報告した。また、Kawamuraら<sup>(8)</sup>、Inoueら<sup>(9)</sup>は急速凝固粉末冶金法(急冷法, RS P/M: rapidly solidified powder / metallurgy)を用いて室温で610 MPaの引張降伏強度と5%の伸び値を併せ持つMg<sub>97</sub>Zn<sub>1</sub>Y<sub>2</sub>合金の作製に成功した。これは比降伏強度に関して世界で初めて超々ジュラルミンを凌駕するMg合金が開発されたことを指す。さらに、その合金は驚異的な強度だけでなく押出成形時の温度に依存して最大15%以上の伸びを示し、Mg実用化の課題であった強度・延性の両立が実現されている。また、Kawamuraら<sup>(8)</sup>、Inoueら<sup>(9)</sup>はLuo-Zhang<sup>(7)</sup>と同様に、作製したMg<sub>97</sub>Zn<sub>1</sub>Y<sub>2</sub>合金中にLPSO構造を有する第二相(LPSO相)の存在を確認した。Kawamuraら<sup>(8)</sup>、Inoueら<sup>(9)</sup>が開発したこの超高強度Mg合金は、新規な結晶構造をとるLPSO相を含有することから「LPSO型Mg合金」または「Mg/LPSO二相合金」と呼ばれ、次世代軽量構造材料としての工業的利用が期待されている<sup>(10)~(12)</sup>。また、Mg-TM-RE三元系合金(TM:遷移金属)においてTMがコバルト(Co)、ニッケル(Ni)、銅(Cu)、Znであり、REがYやガドリニウム(Gd)、テルビウム(Tb)、ジスプロシウム(Dy)、ホルミウム(Ho)、エルビウム(Er)、ツリウム(Tm)などである場合にもLPSO相が形成することが見出されている<sup>(10)</sup>。さらに、Mg-Zn系合金では添加させるREの種類によって、急冷法よりも安価である鋳造法を用いて作製した試料中にもLPSO相が発現することが確認されている<sup>(13)(14)</sup>。このように、製造の面からみてもLPSO型Mg合金の実用化の可能性は急速に拡大されている。また、微視構造に注目するとLPSO型Mg合金は通常のHCP構造を有する $\alpha$ -Mg相とLPSO相の混相組織で構成されており、その優れた力学的特性は塑性加工中に生じるLPSO相のキンク変形とそれに起因した $\alpha$ -Mg相の結晶粒微細化によってもたらされることが近年明らかになりつつある<sup>(12)(15)(16)</sup>。しかしながら、強化相と考えられるLPSO相の発現機構や力学的性質、またキンク変形の詳細なメカニズムならびにそれに端を発する材料強化機構などは未だ解明の途上にあり、実験や数値解析といった多方向からのアプローチによる様々な研究が国内外問わず活発に行われている。

### 1.1.2 LPSO型Mg合金の特徴

前述のようにLPSO型Mg合金は $\alpha$ -Mg相とLPSO相の二相により構成され、Mg<sub>97</sub>Zn<sub>1</sub>Y<sub>2</sub>鋳造合金においてLPSO相は体積分率で約20~25%程度形成する<sup>(13)(17)</sup>。ここで、 $\alpha$ -Mg相の元素組成は約98%をMgが占め<sup>(18)</sup>、結晶構造や力学的性質は純Mgのそれとほぼ同一のものとなる<sup>(17)</sup>。しかしながら、LPSO相はMg元素を全体で9割程度含有しているにもかかわらず<sup>(18)</sup>、既存の金属結晶にはみられないLPSO構造という全く新しい原子配列構造を有している。本項では、 $\alpha$ -Mg相または純MgとLPSO相の構造学的な特徴および力学的性質を両者の対比を踏まえながら述べる。なお、

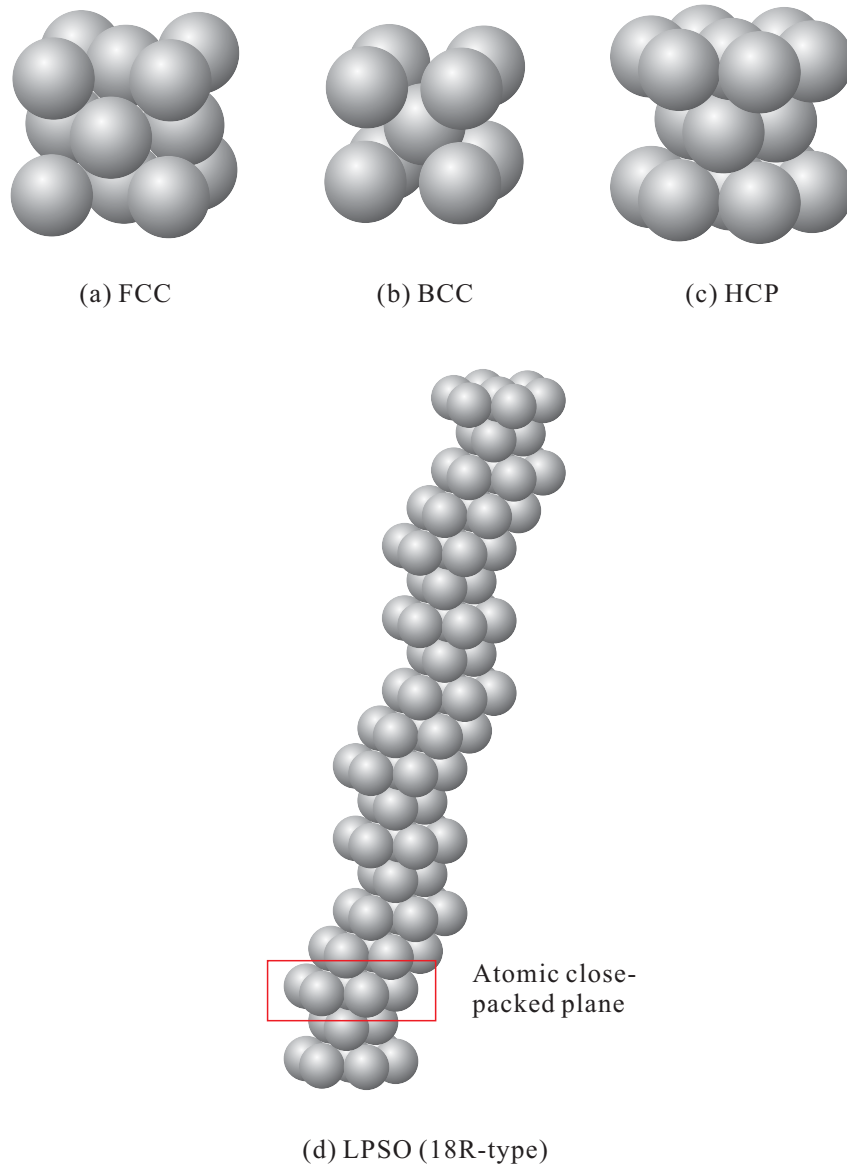


Fig. 1.1 Various crystal structures.

LPSO 構造は Ni-Ti 系合金にも発現することが報告されているが<sup>(19)</sup>, 本論文では Mg を基盤とした合金に形成されるもの, すなわち Mg 基 LPSO 構造/相を指すこととする.

#### (a) 結晶構造

金属の代表的な結晶構造には面心立方 (FCC: face-centered cubic) 構造 (図 1.1(a)), 体心立方 (BCC: body-centered cubic) 構造 (図 1.1(b)) および六方最密充填 (HCP) 構造 (図 1.1(c)) の 3 種類があり, Al や Cu が FCC 構造, 鉄 (Fe) やクロム (Cr) が BCC 構造をとるのに対して本研究で対象とする Mg はじめ, Zn やカドミウム (Cd), チタン (Ti), Y などは HCP 構造を有する<sup>(20)(21)</sup>. LPSO 構造は, 最密原

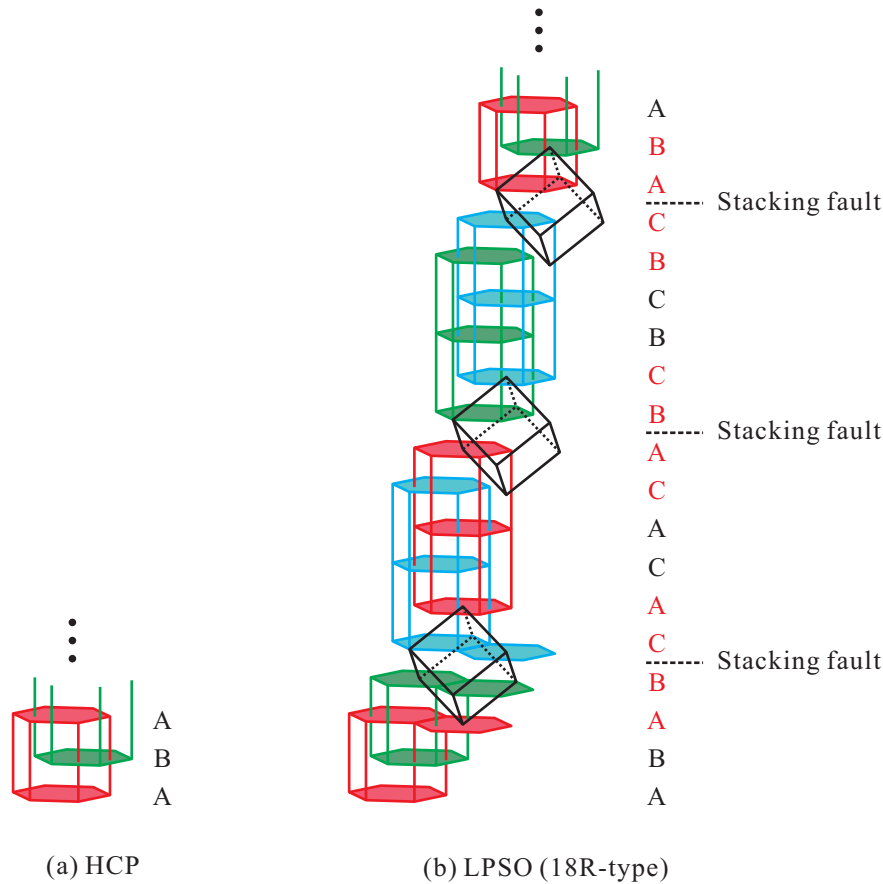


Fig. 1.2 Crystal structures of HCP and LPSO.

子面における原子配置がHCP構造のそれと酷似しているが、単位格子は図1.1(d)のようにHCP構造が紙面内で縦方向に連結したような構造をとり、最密原子面垂直方向に非常に長い周期性を持つ。また、LPSO構造は単位格子における最密原子面の積層数に応じて10H、14H、18Rおよび24R型などがこれまでに確認されているが<sup>(22)</sup>、本項ではMg-Zn-RE系合金の casting 材に多くみられる18R型構造について述べる。なお、LPSO構造の呼称は、単位格子中の最密面の積層数を表す数字と結晶構造を表すアルファベットRまたはHの組み合わせにより表記される。ここで、結晶構造を指すアルファベットは、それぞれ菱面体晶(R: rhombohedral)および六方晶(H: hexagonal)の頭文字である。図1.2は、HCPと18R型LPSOの両構造を多角形で模擬し、立体的に描画したものである。ここで、各結晶格子の右側には最密原子の紙面水平方向に関する積層位置を区別するために、A、Bのように適当なラベルをその位置に応じて表記している。例えば、HCP構造では図1.2(a)のように最密原子面はA層、B層、A層、B層…と2周期性を有するAB積層を示す。一方、LPSO構造では図1.2(b)のようにA層、B層だけでなく新たにC層が導入されることで、3種類の最密面による長周期的な積層となる。また、ABC、CAB、BCA積層といった異なる原子面が連続して積層する構造はFCC構造特有のものであるため、LPSO構造はHCP積層内の局所にFCC積層が導入されることがわかる。したがって、図1.2(b)に示すようにLPSO構造は単位格子中に積層欠陥を有する構造となる。同様の議論は、他の3種類のLPSO構造に対しても一意に行うことができる。また、

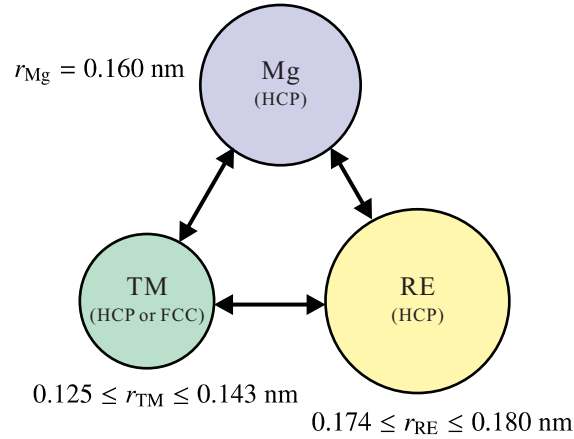


Fig. 1.3 Condition for atomic radius of each element for generation of LPSO phase<sup>(10)</sup>.  $r_X$  represents atomic radius.

LPSO 構造では、図 1.2(b)において赤字で記した積層欠陥を挟む 4 最密原子面に TM や RE の添加元素が濃縮しており、化学的にも規則化した長周期構造となることが報告されている<sup>(23)</sup>。図 1.2(b)の 18R 型構造ではそれらは 6 最密面ごとに現れ、他の LPSO 構造では 5 最密面 (10H 型)、7 最密面 (14H 型)、8 最密面 (24R 型) ごととなる<sup>(22)(23)</sup>。このような積層欠陥による構造変調と添加元素による化学的な濃度変調が単位格子中に同周期で導入された構造は「シンクロ型 LPSO (Synchronized LPSO) 構造」と呼ばれ<sup>(22)</sup>、新規な結晶構造として構造学的にも注目されている。なお、LPSO 構造の発現には、添加する TM 元素および RE 元素単体の結晶構造、原子半径、Mg への固溶限、混合エンタルピーなどが関連することが明らかにされている<sup>(10)</sup>。図 1.3 は LPSO 構造形成に必要な添加元素の原子半径の大きさおよび単体における結晶構造を示したものである<sup>(10)</sup>。同図に示すように添加元素の大きさは Mg 原子とは異なるため、前述の添加元素が濃化した 4 最密原子面における原子間隔はその他の最密面における値とは異なったものとなる。さらに、近年ではこの添加元素濃化が生じる 4 最密原子面が  $\text{Li}_2$  型構造のクラスターで構成されていることが明らかにされている<sup>(23)</sup>。以上のように、LPSO 構造は単位格子中の局所的な構造変調および濃度変調により特徴づけられるため、LPSO 構造を論じる際には図 1.2(b)に示すような局所の構造に注目する必要がある。

なお、LPSO 構造に対する Miller 指数の表記には、簡単化のために HCP 構造と同様に 4 指標表記を用いることが多い。図 1.4 は HCP 構造の Miller 指数の表記に用いる結晶基底を表す。同図に示すように最密原子面内に 120 度の間隔を空けて 3 つ ( $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ )、それらに垂直な方向に 1 つ ( $\mathbf{c}$ ) の結晶基底を取り、 $\{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3 \mathbf{c}\}$ の成分を書き下して方向や面を  $[uvw]$ ,  $(uvw)$  と表す。ただし、3 つの  $\mathbf{a}$  ベクトルは互いに独立ではないため、Miller 指数における 3 つ目の指標の  $t$  は  $t = -(u+v)$  という制約を受ける点に注意しなくてはならない<sup>(21)</sup>。したがって、例えば  $\mathbf{a}_1$  方向は  $[2\bar{1}10]$ 、 $\mathbf{a}_3$  方向は  $[\bar{1}\bar{1}20]$  とそれぞれ記される。また、一般に  $\mathbf{a}$  ベクトルと  $\mathbf{c}$  ベクトルの大きさの比は 1:1 ではなく、材料によって固有の比率を有する。この  $\mathbf{a}$  ベクトルと  $\mathbf{c}$  ベクトルの大きさの比  $r_{\text{HCP}} \equiv |\mathbf{c}|/|\mathbf{a}|$  を軸比と呼び、HCP 結晶の変形の理解において重要な物性値となる<sup>(21)</sup>。また、最密面における最密原子方向にとった軸を  $a$  軸、最密面に垂直方向にとった軸を  $c$  軸と呼ぶ。



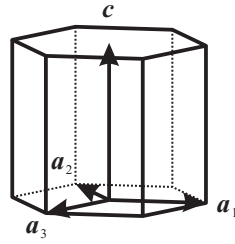
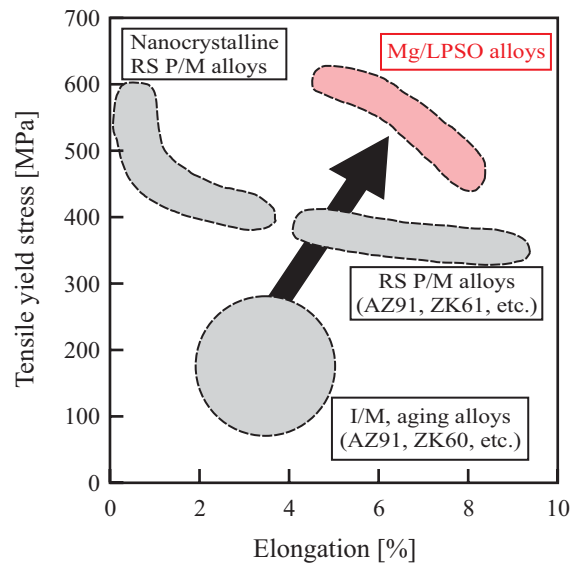


Fig. 1.4 Crystal basis for HCP structure.

## (b) 種々の性能

図 1.5 は LPSO 型 Mg 合金および様々な製法で作製した既存の Mg 合金の室温における引張降伏力と塑性伸びの関係を表したものである<sup>(9)</sup>。同図に示すように、LPSO 型 Mg 合金は既存の Mg 合金に比べて優れた強度と延性を併せ持つ材料となることがわかる。また、図 1.6 は室温および 473 K の温度下における既存 Mg 合金、LPSO 型 Mg 合金および既存 Al 合金の比引張降伏強度を比較したものである<sup>(12)</sup>。なお、LPSO 型 Mg 合金に関しては一般的な鋳造押出法、切削チップ固化成形法および急冷法により作製された 3 種類の材料について記載している。同図 (a) より、3 種類の LPSO 型 Mg 合金の中では急冷材が最も優れた強度を有することがわかる。しかしながら、LPSO 型 Mg 合金押出材の比強度も超々ジュラルミンを超えており、LPSO 型 Mg 合金は製法に依らず優れた強度を有するといえる。また、同図 (b) より LPSO 型 Mg 合金は他の既存合金と比較して 473 K の高温下でも優れた比強度を保持しており、耐熱性に優れた材料であることがわかる。なお、図 1.6 に示したように LPSO 型 Mg 合金は急冷法で作製した際に最も優れた力学特性を示すことから、近年は特に LPSO 型 Mg 合金急冷材に対する研究が盛んに行われている。表 1.1 は  $Mg_{96.7}Zn_{0.85}Y_2Al_{0.45}$  の急冷材と超々ジュラルミンの各種特性を比較したものである<sup>(10)(11)</sup>。表 1.1 より、LPSO 型 Mg 合金

Fig. 1.5 Relation between tensile yield stress and plastic elongation of each alloy at room temperature<sup>(9)</sup>.

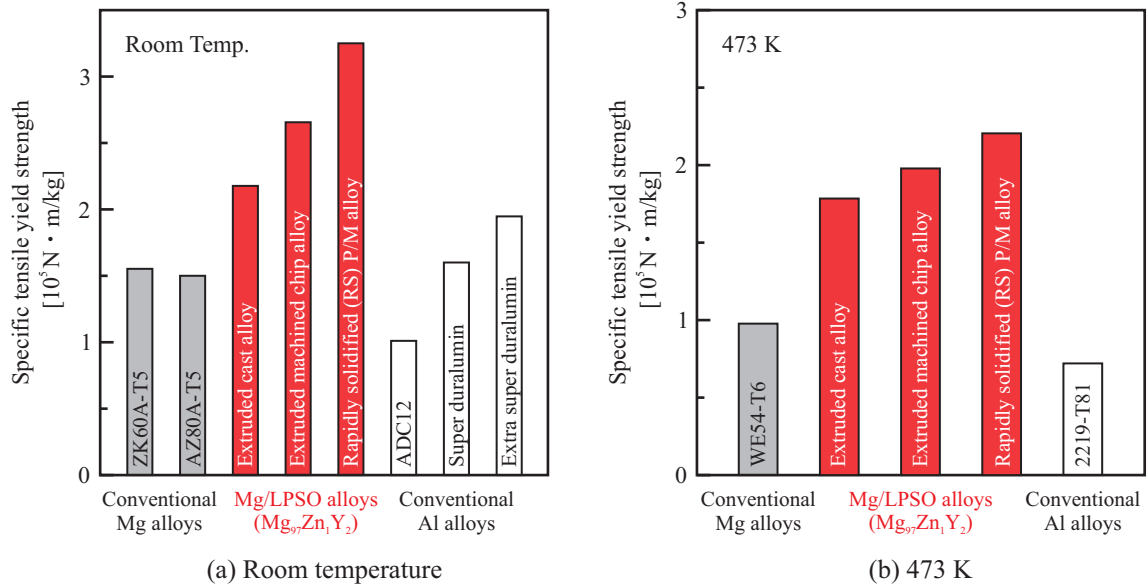


Fig. 1.6 Specific tensile yield strength of each alloy at room temperature and 473 K, respectively<sup>(12)</sup>.

は特に優れた疲労強度と耐食性を有することがわかる。耐食性に関しては、開発初期の Mg-Zn-Y 三元系合金では  $\alpha$ -Mg 相と LPSO 相の界面でガルバニック腐食が生じやすいため、その対策が講じられてきた<sup>(10)</sup>。そして、Al や La を微量添加すると生成被膜の膜質が改善されて耐食性が向上することが明らかにされ、添加元素量の最適化および Fe 等の不純物濃度の低減により超々ジュラルミンの 2 倍に近い耐食性を有する  $\text{Mg}_{96.7}\text{Zn}_{0.85}\text{Y}_2\text{Al}_{0.45}$  合金が開発された<sup>(10)</sup>。この高耐食 LPSO 型 Mg 合金は、Mg 合金は腐食しやすいという従来の概念を覆すものとなっている。また、LPSO 型 Mg 合金急冷材の利点として、623 K 程度の温度下で高速超塑性を示し優れた成形加工性を有する点が挙げられる<sup>(24)</sup>。超塑性現象を利用した加工は Al 合金や Ti 合金などで既に実用化されているが、それらの合金では超塑性が発現する加工速度が  $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \sim 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  に限定され、一つの製品を作り上げるのに多くの時間を要する<sup>(24)</sup>。その一方で、LPSO 型 Mg 合金急冷材では加工速度  $\dot{\epsilon} = 10^{-2} \sim 10^{-1} \text{ s}^{-1}$  の場合に超塑性を示すことから、製品の製造時間を大幅に短縮できるといわれている<sup>(24)</sup>。以上の工業的な利点から、LPSO 型 Mg 合金急冷材の実用化がとくに期待されている。

Table 1.1 Comparison of characteristics between Mg/LPSO RS P/M alloy and extra super duralumin<sup>(10)(11)</sup>.

	Mg/LPSO RS P/M alloy ( $\text{Mg}_{96.7}\text{Zn}_{0.85}\text{Y}_2\text{Al}_{0.45}$ )	Extra super duralumin (7075-T6)
Specific weight	1.85 g/cm <sup>3</sup>	2.75 g/cm <sup>3</sup>
Yield stress (0.2% proof stress)	533 MPa	505 MPa
Elongation	10.6 %	11.0 %
Fatigue strength ( $10^7$ cycles)	325 MPa	275 MPa
Corrosion rate	0.160 mm/year	0.285 mm/year

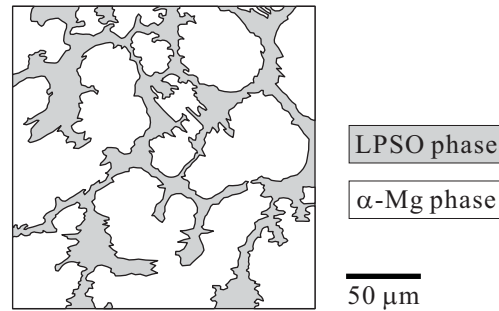


Fig. 1.7 Microstructure of as-cast Mg/LPSO ( $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Y}_2$ ) alloy<sup>(25)</sup>.

しかしながら，急冷法は一般的な鋳造押出法に比較して材料製造コストがかかるため，急冷材の用途は航空宇宙産業・医療産業等のいわゆる一点ものとして運用される製品に限定される．したがって，自動車等で用いる大量生産品には低コストで製造可能な鋳造押出法が望まれる．そこで，次項目以降ではLPSO型Mg合金の押出材に焦点をあて，その力学特性，材料組織ならびに材料強化機構を詳細に述べる．

### (c) 鋳造押出材の特徴

図 1.7 に LPSO 型 Mg 合金の研究において最も頻繁に用いられる  $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Y}_2$  合金の鋳造まま材の材料微視組織の概略を示す．ここで，灰色に色付けした領域は LPSO 相，その他の領域は  $\alpha\text{-Mg}$  相をそれぞれ表している．図 1.7 に示すように，LPSO 型 Mg 合金の鋳造材では LPSO 相が材料内にデンドライト状に存在する．このような鋳造材に押出加工を施した後の材料微視組織の概略を図 1.8 に示す．ここで，同図 (a) は押出方向に平行な面の組織，同図 (b) は押出方向に垂直な面の微視組織をそれぞれ表している．図 1.7 および図 1.8 に示すように，LPSO 相は押出しによって押出方向に伸展し，押出しに垂直な方向に厚みをもった板状の組織として材料内にランダムに存在する．なお，前述のようにこの  $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Y}_2$  合金において LPSO 相は体積分率で材料の約 24% を占める<sup>(17)(26)</sup>．LPSO 型 Mg 合金の押出材はこのような微視組織を有するため，LPSO 相の伸展方向とその他の方向で強い力学的異方性を示す．図 1.9 は  $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Y}_2$  合金押出材を LPSO 相の伸展方向と平行 ( $0^\circ$  方向) に圧縮した場合の降伏応力の温度依存性<sup>(17)</sup> であり，室温においては LPSO 相の伸展方向から  $45^\circ$  傾いた軸 ( $45^\circ$  方向) に対する圧縮の結果も掲載している．同図から明らかなように，室温において  $0^\circ$  方向の強度は  $45^\circ$  方向の強度のおよそ 1.5 倍高い．ここで，このような異方性の研究は，LPSO 相単相で構成される一方向凝固多結晶材に対しても行われている．図 1.10 は結晶粒成長を一方向に制御して作製された LPSO 相単相の一方向凝固多結晶材の微視組織を表しており，この材料では結晶の多くが同図 (d) のような方位を有している．この材料に対して結晶成長方向に平行な方向 ( $0^\circ$  方向) およびそれから  $45^\circ$  傾いた方向 ( $45^\circ$  方向) に圧縮を加えた場合の降伏応力の温度依存性を図 1.11 に示す．同図より，LPSO 相単相一方向凝固材においても  $0^\circ$  方向の強度が  $45^\circ$  方向のものを上回っており，極めて強い力学的異方性を有していることがわかる．したがって，図 1.9 および図 1.11 より，LPSO 相が材料内部で一方向に整列することによってその方向に対する強度が大きく向上することがわかる．このような現象は繊維強化材に見られるものと同様で

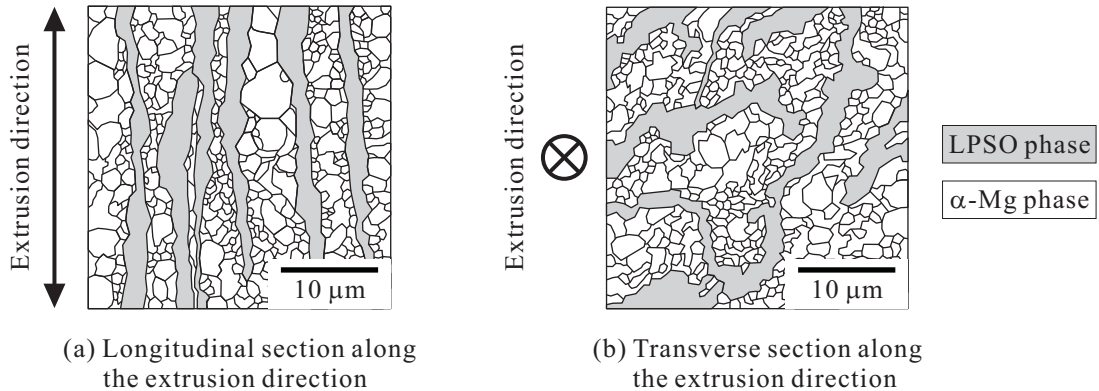


Fig. 1.8 Microstructure of extruded Mg/LPSO ( $Mg_{97}Zn_1Y_2$ ) alloy<sup>(26)</sup>.

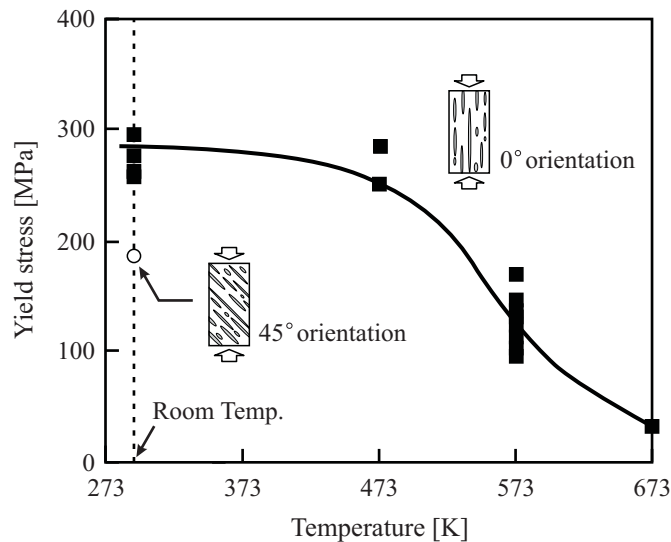


Fig. 1.9 Temperature and orientation dependence of yielded stress of extruded Mg/LPSO ( $Mg_{97}Zn_1Y_2$ ) alloy<sup>(17)</sup>.

あり、材料内部のLPSO相の分布、形状および配向などが材料の力学特性に大きく影響を及ぼすと考えられる。なお、図1.11からわかるようにLPSO相は73 K程度の極低温においても塑性変形を生じる<sup>(27)</sup>。

また、 $Mg_{97}Zn_1RE_2$ 系LPSO型Mg合金の押出材は473 Kまで室温と同程度の強度を保持し、その際の延性は添加するREの種類に応じてばらつきはあるものの、およそ4~13%程度と報告されている<sup>(28)</sup>。既存AZ31B合金押出材の同温度における延性が65%程度であること<sup>(29)</sup>を考慮すると、既存Mg合金と比較すればLPSO型Mg合金押出材の473 Kにおける加工性は低いものと考えられる。ただし、より高温におけるLPSO型Mg合金押出材の加工性の詳細な報告は見当たらず、また同合金の押出材は前述のように顕著な力学的異方性を示すことから、同押出材の加工性に関する詳細な報告が待たれる。

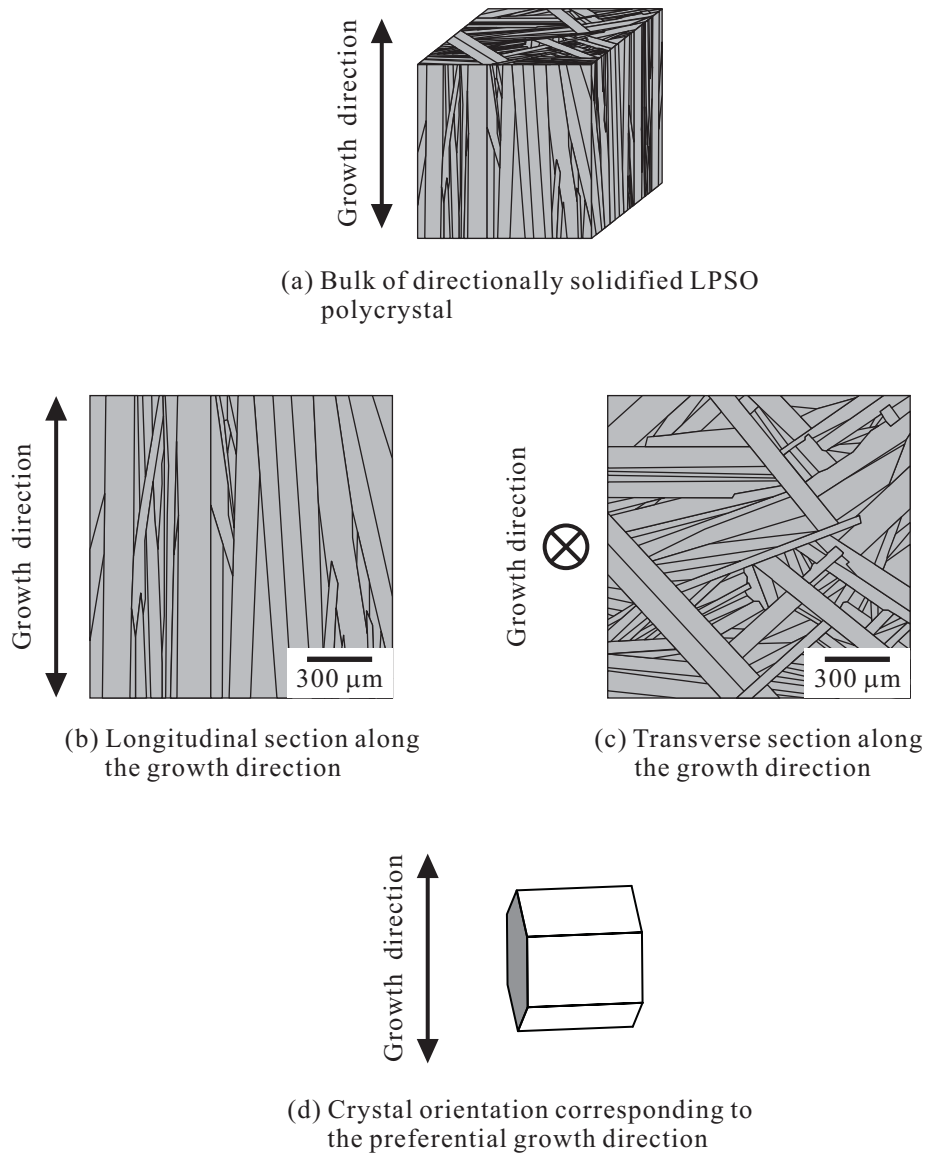


Fig. 1.10 Microstructure of directionally solidified polycrystal composed of LPSO single phase ( $\text{Mg}_{88}\text{Zn}_5\text{Y}_7$ )<sup>(27)</sup>.

#### (d) 活動系

金属の塑性変形の素因は転位の運動であり，転位の運動する面，運動する方向の組み合わせを活動系と呼ぶ．Mgの活動系には古くから $(0001) \langle 11\bar{2}0 \rangle$ 底面系と $\{10\bar{1}2\} \langle \bar{1}011 \rangle$ 引張双晶系が知られており，その後の研究により表 1.2 に示す多数の活動系が報告されている<sup>(21)(30)(31)</sup>．ここで，HCPの最密原子面は底面と呼ばれる．表 1.2の活動系のうち，底面系，柱面系，一次・二次錐面系はすべり変形が生じる活動系であり，引張双晶系と圧縮双晶系は双晶変形が生じる系である．また，Mgではすべり変形が生じる活動系のうち，常温で活動しやすい系は底面系のみであり，底面系以外のすべり変形を起こす系，すなわち柱面系と一次・二次錐面系をまとめて非底面系と呼ぶことが多い．ただし，非底面系は環境温度を上げることで臨界分解せん断応力(CRSS: critical

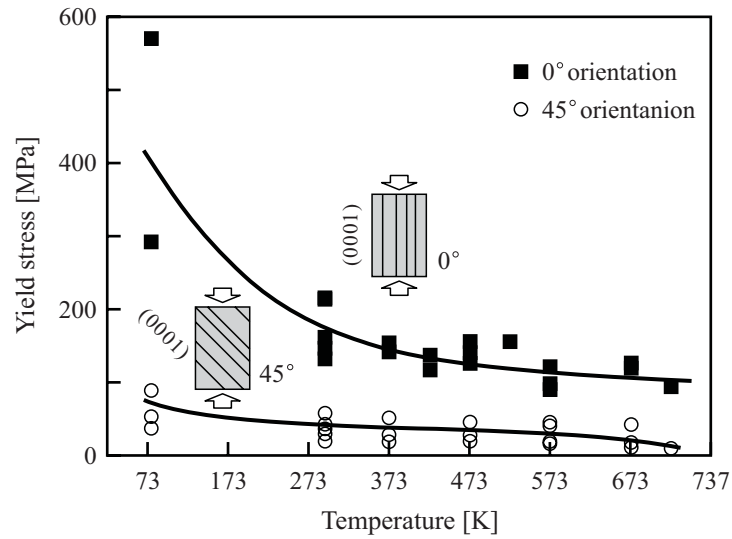


Fig. 1.11 Temperature and orientation dependence of yield stress of directionally solidified polycrystal composed of LPSO single phase ( $\text{Mg}_{88}\text{Zn}_5\text{Y}_7$ )<sup>(27)</sup>.

resolved shear stress)が低下し、活動が盛んになることが知られている<sup>(1)(32)(33)</sup>。 $\alpha$ -Mg相における活動系は純Mgと同じものであるが、双晶変形の進展はLPSO相との界面に達したところで停止することが報告されている<sup>(34)</sup>。図1.12に活動すべり系のすべり方向およびすべり面を、図1.13(a)に $\{10\bar{1}2\}\langle\bar{1}011\rangle$ 引張双晶系の変形方向および双晶面をそれぞれ示す。

一方、LPSO相ではMgと同様に $(0001)\langle11\bar{2}0\rangle$ 底面すべり系の活動が支配的となり、そのCRSSはMgの約10倍以上と非常に大きいことが報告されている<sup>(27)(35)</sup>。また、Mgで容易に発生する引張双晶変形はLPSO相では生じず、LPSO相の $a$ 軸に対する圧縮強度はMgに比べて非常に大きなものとなる<sup>(17)</sup>。ここで、LPSO相において双晶変形が生じない理由は、LPSO相が前述の複雑な原子配列構造を有することおよびLPSO構造における添加元素の濃化に起因すると考えられている<sup>(27)</sup>。なお、LPSOのマイクロ試験片に対する実験において、通常Mgでは発生頻度が少ない $\{11\bar{2}1\}\langle\bar{1}\bar{1}26\rangle$ 引張双晶系(図1.13(b)参照)の活動が報告されている<sup>(36)(37)</sup>。しかしながら、LPSO相多結晶で構成されるバルク材ではその活動は確認されておらず、 $\{11\bar{2}1\}\langle\bar{1}\bar{1}26\rangle$ 双晶系がLPSO相におけるひずみをどの程度担うことができるか不明瞭である。また、LPSO相における非底面系の活

Table1.2 Slip / twinning system families of Mg.

Family	Number of systems	Plane	Direction
Basal	3	$(0001)$	$\langle11\bar{2}0\rangle$
Prismatic	3	$\{10\bar{1}0\}$	$\langle11\bar{2}0\rangle$
First-order pyramidal	6	$\{1\bar{1}01\}$	$\langle11\bar{2}0\rangle$
Second-order pyramidal	6	$\{11\bar{2}2\}$	$\langle11\bar{2}3\rangle$
Tensile twin	6	$\{10\bar{1}2\}$	$\langle\bar{1}011\rangle$
Compression twin	6	$\{\bar{1}011\}$	$\langle10\bar{1}2\rangle$

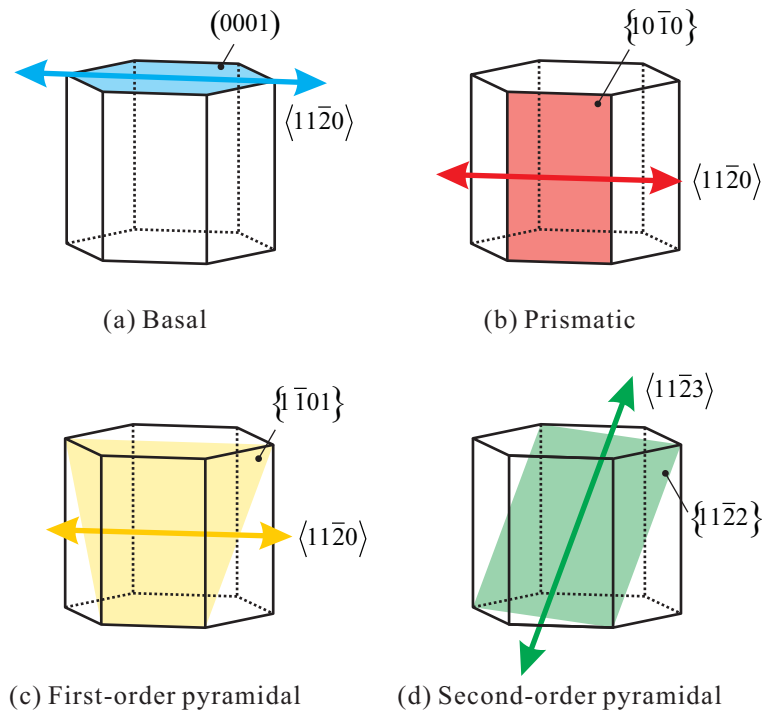


Fig. 1.12 Slip systems in  $\alpha$ -Mg phase and LPSO phase. Drawn plane and arrow denote slip plane and slip direction, respectively.

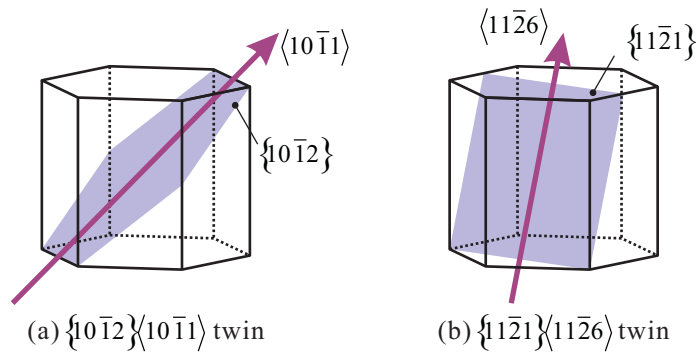


Fig. 1.13 Deformation twin.

動に関しては、Mgと同様に高温度下でわずかに活動を開始するが、その複雑な結晶構造ゆえにCRSSはMgよりも大きなものとなる<sup>(27)(35)(38)</sup>。したがって、常温において、LPSO相における転位運動は主に底面系の活動によって引き起こされる。以上の $\alpha$ -Mg相とLPSO相の活動系の対比を表1.3にまとめる。

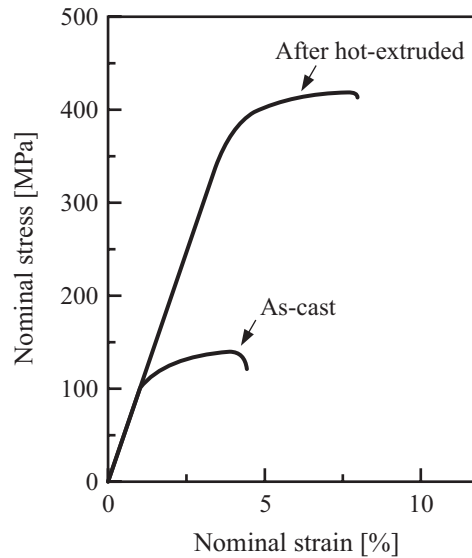


Table 1.3 Similarities and differences between  $\alpha$ -Mg phase and LPSO phase.

	$\alpha$ -Mg phase	LPSO phase
Basal slip	Predominantly occur	
Non-basal slips	Activated only at high temperature	
{10 $\bar{1}2$ } < $\bar{1}011$ > Twinning	Occur	Not occur

## (e) 材料強化機構とキンク変形

LPSO型Mg合金は鋳造ままの状態では平凡な力学特性しか示さないが、623～723 K程度の温度下で押し出しや圧延などの塑性加工を施すことによりその特性は著しく向上することが知られている<sup>(12)(15)(39)</sup>。図1.14はMg<sub>97</sub>Zn<sub>1</sub>Y<sub>2</sub>の鋳造材および押し出し材の室温における公称応力-ひずみ線図である<sup>(12)</sup>。同図より鋳造材と押し出し材の降伏応力はおおよそ4倍異なっており、延性も約1.5倍向上していることが見てとれる。このように押し出し加工によって材料の力学的特性は大幅に向上するが、その原因は加工中の材料微視組織の変化に端を発する。図1.15は、押し出し材に見られる特徴的な微視組織を表したものである。同図に示すように、押し出し後の微視組織は(i)局所的に折れ曲がった変形を呈したLPSO相、(ii)動的再結晶により微細化した $\alpha$ -Mg相および(iii)未再結晶の粗大な $\alpha$ -Mg相加工粒の3つの領域によって特徴づけられる。(i)の折れ曲がったLPSO相に関してみると、図1.15中に示すようにLPSO相の界面は底面と平行であり、局所的な帯状の変形は底面に垂直方向に発生している。このような変形模様は、Orowan<sup>(40)</sup>、Hess-Barrett<sup>(41)</sup>が報告した「キンク変形」と一致しており、その模式図を図1.16に示す。キンク変形は図1.16のように底面に平方な方向に圧縮負荷を与えた場合に生じ、帯状の変形領域はキンク帯と呼ばれる。また、キンク変形は異方性の強い層状物質に見られる塑性座屈形態の一種であり、金属ではCdやZn等、非金属ではSiCやTi<sub>3</sub>SiC<sub>2</sub>

Fig. 1.14 Nominal stress - strain curves of as-cast and extruded Mg/LPSO (Mg<sub>97</sub>Zn<sub>1</sub>Y<sub>2</sub>) alloys<sup>(12)</sup>.



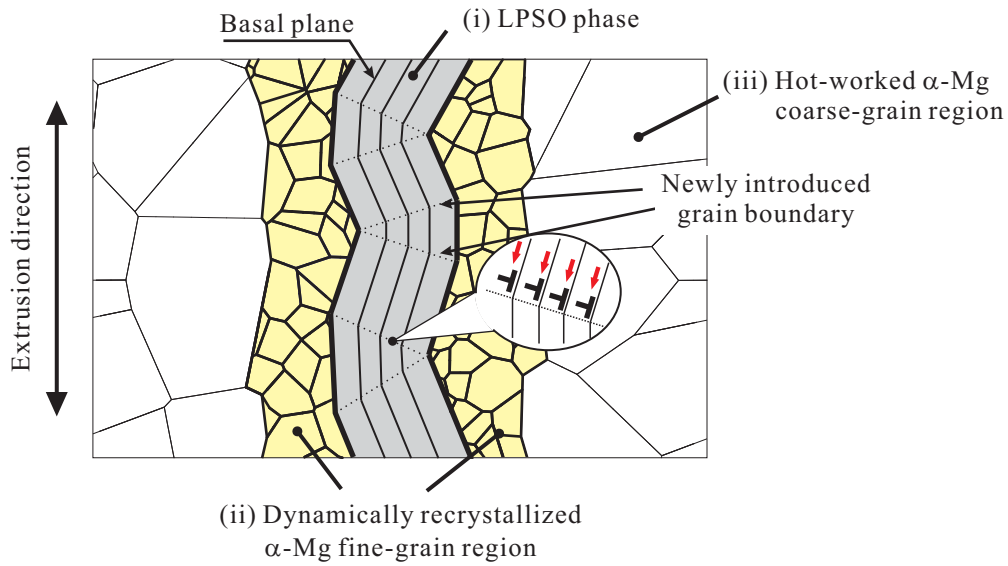


Fig. 1.15 Characteristic microstructure of extruded Mg/LPSO alloy.

等に多く見られる<sup>(40)~(43)</sup>. ただし, Mgに関しては図1.16のように負荷を与えた場合には前述の $\{10\bar{1}2\} \langle \bar{1}011 \rangle$ 双晶系が変形を担うことができるため, Mgおよび $\alpha$ -Mg相においてキンク変形は生じにくい. また, LPSO相におけるこのようなキンク変形は図1.7の鋳造ままの状態では発生しておらず, 押し出しのような圧縮を伴う塑性加工を施すことではじめて形成したものである.

さて, LPSO型Mg合金の押出材はLPSO相のキンク変形により強化されると考えられている. この現象についてYoshimotoら<sup>(15)</sup>は次のように論じている. まず, 塑性加工時のLPSO相のキンク変形によって周囲の $\alpha$ -Mg相には大きなひずみがかかる. そして, 加工時の加熱に起因してそれらの $\alpha$ -Mg相では再結晶が生じる. ここで, この再結晶現象は加工時に変形と同時に発生するため動的再結晶である. 再結晶した $\alpha$ -Mg相は, 添加原子のピンニング効果により粒成長が粒径数ミクロン程度で止まり, 結晶粒が微細化する. これにより図1.15に示すような微視組織が形成される. 一般に, Mgは結晶粒を微細化することで強度だけでなく延性も獲得できるという利点がある.

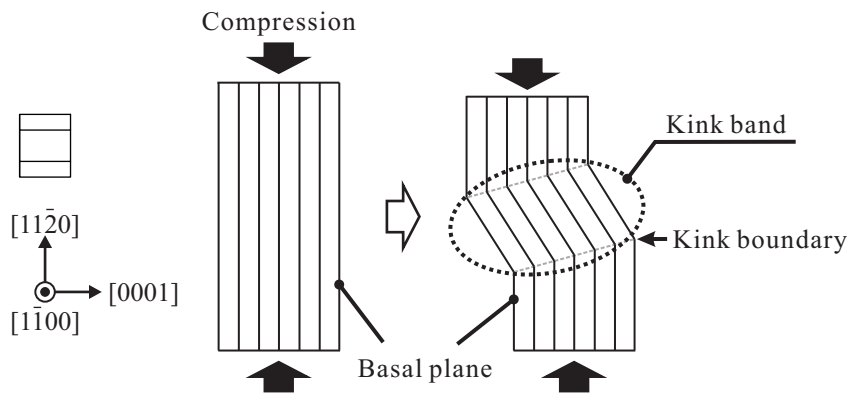


Fig. 1.16 Schematic deformation kink.

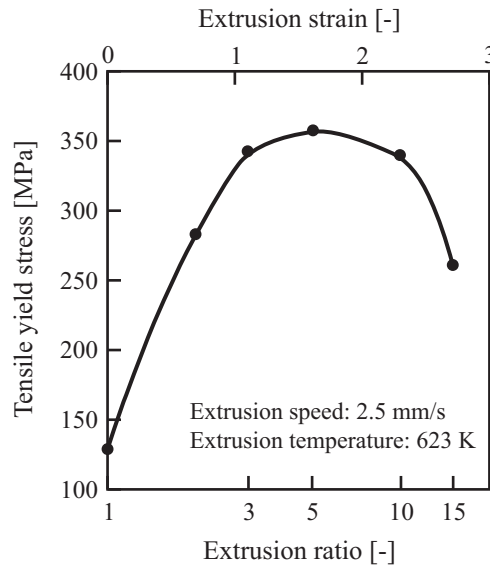


Fig. 1.17 Dependence of tensile yield stress of Mg/LPSO ( $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Y}_2$ ) alloy on extrusion ratio<sup>(12)</sup>.

あるため<sup>(44)~(46)</sup>,  $\alpha$ -Mg相の微細化によって図 1.14 のように強度・延性がともに向上する. 以上は Yoshimoto ら<sup>(15)</sup> が提唱した LPSO 型 Mg 合金押出材の材料強化機構であるが, その後 Yamasaki ら<sup>(47)</sup> も材料内で微細な  $\alpha$ -Mg 相再結晶領域の占める割合が増えるほど合金の強度・延性が向上するという同様の報告をしており, LPSO 相のキンク変形に起因した  $\alpha$ -Mg 相の結晶粒微細化が LPSO 型 Mg 合金の材料強化の重要なメカニズムとなることわかる. また, 図 1.15 および図 1.16 に示すように, キンク帯では底面が上下の領域に対して回転するため, 一度形成されたキンク帯は図 1.15 のように底面系の転位運動に対する大きな抵抗となる. したがって, キンク境界の導入により単結晶が力学的に分断されることで LPSO 相も結晶粒が微細化されると考えることができる. ここで, LPSO 相および  $\alpha$ -Mg 相の両相における結晶粒微細化現象は結晶の力学的分断および動的再結晶というそれぞれ異なるメカニズムに端を発することに注意されたい. また, 図 1.17 は押出加工時の押出比と引張降伏強度の関係を表したものであり<sup>(12)</sup>, 押出比が 5 程度までは押出比を大きくするほど材料が強化されることがわかる. 一般に押出比が大きくなるにつれて LPSO 相に形成するキンク帯の数は増え, LPSO 相の単結晶は多数の領域に分断されるため LPSO 相自身の強度も向上する<sup>(12)(27)</sup>. また, 多数のキンク帯が形成されるほど広範囲に渡って  $\alpha$ -Mg 相にひずみを伝えるため,  $\alpha$ -Mg 相の結晶粒微細化はより促進されて材料を強固なものへと変化させる. 以上の LPSO 型 Mg 合金押出材の材料強化における一連の機構は LPSO 相のキンク帯形成に起因するため, その強化法は「キンク帯強化」と呼ばれ新たな材料強化メカニズムとして注目されている. なお, 近年の研究により LPSO 相のキンク帯形成およびキンク帯強化は塑性加工に限らず, 単純に図 1.7 の鋳造材を圧縮変形させることによっても生じることが報告されている<sup>(25)</sup>.

ここで, キンク変形のように局所的に結晶が大きく回転した場合には, その領域に接する異相界面において剥離が生じ, 破壊の起点になりやすいと考えられる. 実際の材料には, 材料生成の際に LPSO 相に埋め込まれた形で粒径 100 nm 程度の  $\alpha$ -Mg 相のナノ結晶粒が析出して存在しており, この  $\alpha$ -Mg 相ナノ結晶粒とキンク変形した LPSO 相の界面においてマイクロクラックが発生す

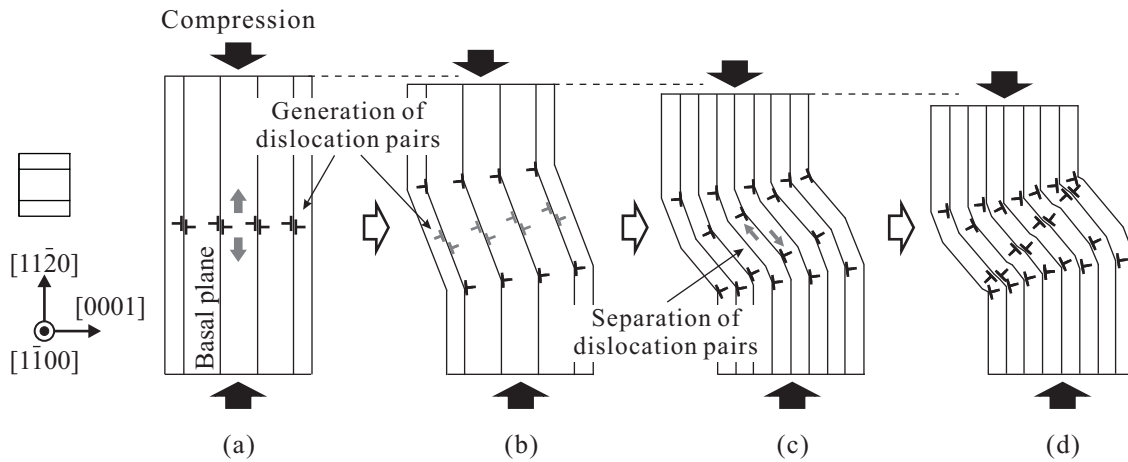
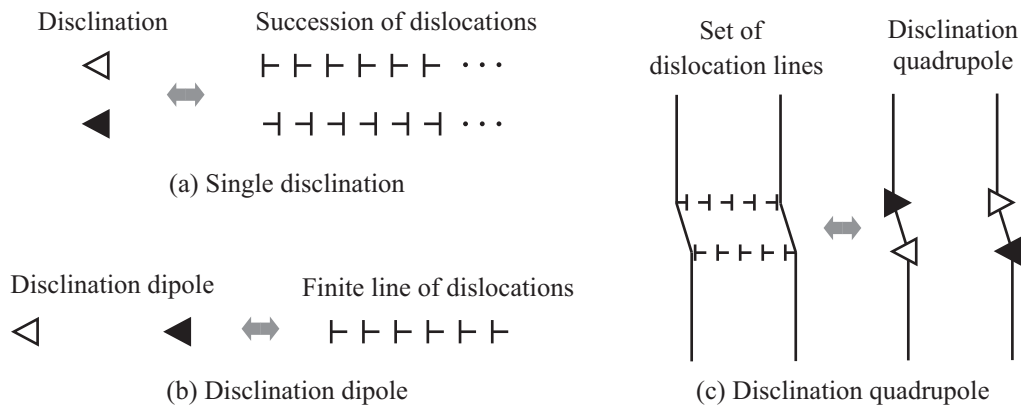


Fig. 1.18 Dislocation model of kink band formation proposed by Hess-Barrett<sup>(41)</sup>.

ることが報告されている<sup>(25)</sup>。しかしながら、図 1.8 および図 1.15 に示すような粒径  $1 \sim 5 \mu\text{m}$  程度の  $\alpha\text{-Mg}$  相の粗大粒と LPSO 相の界面においてはボイドやクラックはほとんど発生しないということも同時に報告されている<sup>(25)</sup>。その理由として、それらの界面が各相の底面系および柱面系が連続的につながった整合界面となっていることに起因すると考えられているが<sup>(25)</sup>、その詳細および LPSO 相と  $\alpha\text{-Mg}$  相の再結晶粒との界面におけるクラック発生についての報告は見当たらない。なお、前述の  $\alpha\text{-Mg}$  相ナノ結晶粒とキンク変形した LPSO 相の界面におけるマイクロクラック発生が図 1.17 の高押し比における強度低下をもたらしたと考えられる。

#### (f) キンク帯形成機構

LPSO 型 Mg 合金はキンク帯強化により材料が強化されるため、工業的利用に向けて最適な材料設計を実現するためにも LPSO 相のキンク帯形成機構の詳細な解明が望まれる。キンク帯の形成機構は Orowan<sup>(40)</sup> により初めて提案され、その後 Hess-Barrett<sup>(41)</sup> が Zn 単結晶中のキンク変形について詳細に検討した。図 1.18 は Hess-Barrett<sup>(41)</sup> が提案したキンク帯形成モデルである。同図のように、彼らはキンク帯を底面系の転位運動に基づいて次のようにモデル化している。実在の材料では不純物や表面粗さ等に由来する初期不整合が含まれるため、その箇所に応力が集中することで（あるいは初期不整合に起因した弾性座屈により底面がわずかに傾斜することで）、同図 (a) のように底面に平行方向に圧縮を加えた場合に局部的に塑性変形が発生する。これにより底面系の転位が爆発的に生成し、その後の負荷に対してそれらはそれぞれ反対方向に運動したのちに一列に蓄積する。この過程を繰り返すことで同図 (d) のようなキンク帯が形成される<sup>(41)</sup>。一方で、Romanov ら<sup>(48)</sup> は金属中のキンク帯は結晶回転の不整合により生じる回位に基づいて形成すると論じている。回位（転傾, disclination）は回転性の結晶欠陥であり、転位の組織と図 1.19 に示すような関係を有する<sup>(48)</sup>。ここで、図 1.19 における色なしの三角形は負の回位、黒色の三角形は正の回位をそれぞれ表しており、それらは単独で同図 (a) のような転位列と等価となる。また、同図 (b) は回位二重極（ダイポール）、同図 (c) は回位四重極構造をそれぞれ表している。したがって、同図 (c) のようにキンク帯は 2 つの転位列および回位四重極構造のいずれを用いても表現することができる。た

Fig. 1.19 Relation between disclination and dislocation<sup>(48)</sup>.

だし、それら2通りの表現方法はそれぞれ異なるスケールの観点に立脚している。すなわち、転位列による表現は、個々の転位が列状に集合することでキンク境界を形成するため、微視的な観点からキンク帯を捉えている。一方、回位を用いた場合には転位組織を粗視化してより巨視的な観点からキンク帯を表現している。したがって、キンク帯を捉えるスケールの違いはあるものの Hess-Barrett<sup>(41)</sup>、Romanov ら<sup>(48)</sup>の双方がキンク帯形成の素因は転位の運動であると考えている。

以上は既存の金属におけるキンク変形に対して構築されたモデルであり、このキンク帯形成モデルを LPSO 相にそのまま適用できるかは定かでない。しかしながら、Hagihara ら<sup>(27)(49)</sup>は LPSO 相の圧縮試験を非底面系の活動がみられない常温において行い、その場合にも LPSO 相はキンク変形しキンク境界に多数の底面転位が観測されることを報告している。この観察事実は図 1.18 におけるキンク帯形成モデルと整合したものであり、このことから LPSO 相におけるキンク帯形成に対しても図 1.18 のモデルが適用可能と考えられている。一方、近年 LPSO 相単結晶のマイクロ試験片に対する実験が行われはじめ、その試験片においてキンク変形は生じず、前述の  $\{11\bar{2}1\}\langle\bar{1}\bar{1}26\rangle$  双晶変形 (図 1.13(b) 参照) が発生するという報告もなされている<sup>(36)(37)</sup>。図 1.13(b) の双晶変形によりもたらされる結晶方位差は幾何学的に約  $34^\circ$  と定まるが、仮に図 1.18 のモデルにより形成したキンク帯の結晶方位差が組織観察した際に同程度であった場合には形成した変形帯が双晶帯なのか、あるいはキンク帯なのかその判断は難しい。これは LPSO 相に限った問題であり、現在でも LPSO 相において形成したキンク帯は本当にキンク帯なのか、双晶帯ではないのかと議論されている。しかしながら、観察される LPSO 相のキンク変形の中には明らかに結晶方位差が前述の  $\{11\bar{2}1\}\langle\bar{1}\bar{1}26\rangle$  双晶帯とは異なるものが多く見られており、現在は多くの研究者が LPSO 相において形成した変形帯はキンク帯であると考えている。また、その素過程は Hess-Barrett<sup>(41)</sup> が提案した図 1.18 のモデルに従う底面系の転位運動であるとみなしている。しかしながら、実験的に図 1.18 のモデルのような転位の挙動を捉えるのは非常に困難である。そこで、数値シミュレーションを用いた転位運動に基づくキンク帯形成の再現およびその詳細なメカニズムの解明、ひいてはキンク帯強化による材料の最適な強化過程に関する知見の獲得が期待されている。

なお、一般にキンク境界には図 1.18 のように多数の転位が蓄積するため、SiC 等の材料では応力集中によるキンク境界におけるクラック発生の事例が多数報告されている<sup>(42)(43)</sup>。しかしなが

ら、LPSO相のキンク境界近傍には底面系の転位に付随する形でBurgersベクトルに $c$ 軸成分を有する転位の蓄積が見られ、その箇所ではクラックの発生が抑制されることが新たに報告されている<sup>(50)</sup>。したがって、それらの転位の蓄積がLPSO相のキンク境界におけるクラック発生を有効的に抑制し、それにより材料は破壊に至ることなく強度を保持すると考えられる。ただし、その詳細なメカニズムに関しては文献<sup>(50)</sup>を参照されたい。

## 1.2 LPSO相に対する数値解析例

前節で述べたように、LPSO型Mg合金の材料強化の主因はLPSO相のキンク変形であり、計算力学的手法によるキンク変形のメカニズム解明が期待されている。LPSO相に対する数値解析例として結晶塑性論<sup>(51)~(53)</sup>を用いたキンク変形解析<sup>(54)</sup>、分子動力学法を用いたキンク変形解析<sup>(55)</sup>、ばね-質点系モデルを用いたキンク変形モード解析<sup>(56)</sup>等が挙げられる。その中でも特に、実現象に即した空間スケール・時間スケールで対象をモデル化可能な、連続体力学に立脚した結晶塑性モデルが注目されている。結晶塑性論では、金属の塑性変形の最小単位を結晶格子の塑性せん断ひずみ、いわゆる「すべり」と定めており、各活動すべり系のすべりの程度は加工硬化をもたらす変形抵抗の大きさにより決定される。そのため、活動系ごとに異なる変形抵抗をモデル化することで塑性異方性が簡便に表現できる。LPSO相における変形抵抗のモデル化に関しては、LPSO相の実験データが乏しいこともあり一般化されたモデルは現在までに構築されていない。そこで、LPSO相に対する結晶塑性解析では、結晶構造の類似性からMgに対するモデルがそのまま適用されることが多い<sup>(54)</sup>。Mgに対する変形抵抗のモデルには様々なタイプがあり、代表的なものとしてはすべりの総量を引数とした関数を実験結果にフィットするように定めたものがあるが<sup>(57)~(59)</sup>、近藤ら<sup>(60)</sup>は転位の作る弾性場からボトムアップ式に変形抵抗を計算する転位-結晶塑性モデル<sup>(61)(62)</sup>をMgに対して適用できるように拡張している。転位-結晶塑性モデルでは、従来の結晶塑性モデルと同様にすべりの集積として表されるマクロな塑性変形を扱うことが可能である一方、転位の易動度や転位の作る弾性場の活動系間の相互作用などを入力パラメーターとして定めることができるため、従来の結晶塑性モデルよりも現象をミクロに捉える事ができるという利点がある。したがって、底面すべりと転位密度を同時に考慮できる転位-結晶塑性モデルはLPSO相のキンク変形に対する解析に適しているといえる。

## 1.3 従来の数値解析における問題点

結晶塑性論あるいは転位-結晶塑性論を用いて数値解析を行う場合、有限要素法を用いることが多い。有限要素法では対象とする領域を有限な大きさをもつ要素に離散化するが、従来の連続体モデルでは構成式に物質点で閉じた局所形のものを使用するため、せん断帯形成などの解析を行った場合にせん断帯の幅などが要素分割（メッシュ分割）に依存するという問題を有する<sup>(63)</sup>。すなわち、メッシュ分割が粗い場合は形成するせん断帯の幅は大きくなり、一方でメッシュ分割を細かくするほどせん断帯の幅は小さくなる。しかしながら、実現象として形成するせん断帯の幅は有限であるため、従来の理論では現象を十分に再現できないといえる。また、従来の結晶塑



性論あるいは転位-結晶塑性論に基づくFEM解析では、せん断帯におけるすべりや転位密度、結晶方位等の諸量にもメッシュ依存性が現れるため、それらの量に関して実験結果との定量的な比較・評価を行うことができない。なお、変形が解析領域で一様に生じる場合には一般にメッシュ分割を細かくするほど計算精度は向上するが、せん断帯形成のように局所的に変形が生じる場合、あるいは境界条件に点荷重や点拘束を与えた場合には解析結果にメッシュ依存性が現れるため計算精度は低下する。このようなメッシュ分割と局所変形に関連した計算精度の関係については文献<sup>(64)</sup>を参照されたい。

上記の問題はLPSO相のキンク変形に対する解析にも同様に当てはまる。実際に、従来の結晶塑性論に基づいたキンク帯形成のFEM解析<sup>(54)</sup>ではキンク帯形成過程でメッシュ依存性が現れており、メッシュ分割に依存して応力-ひずみ曲線やキンク帯における結晶格子の回転の大きさに関する数値解析解が異なるものとなっている。以上のように、キンク変形のような一種のひずみ局所化現象を定量的に予測する上で解析解のメッシュ依存性の発現は望ましくない。

## 1.4 高次理論の適用と寸法効果の表現

前節で述べたひずみ局所化問題のメッシュ依存性は、高次理論の適用により大幅に軽減されることが知られている<sup>(63)(65)</sup>。高次理論とはひずみこう配とそれに対応する高次応力が陽に仕事をなすと考える理論<sup>(53)(66)~(70)</sup>であり、構成式に周囲の物質点の情報が導入されるため変形の局所化は軽減される。また、その際に情報を取り込む領域の大きさに対応した材料固有の特性長が構成式に導入される。なお、従来の連続体理論は局所形の構成式を考えているため、その際の特性長は零に相当する。また、一般に有限の特性長を有するモデルは解析領域の大きさと特性長の比を陽に扱うことができるため、寸法効果を有する。寸法効果とは諸量の値が解析領域の大きさに依存する現象であり、金属材料では一般に試験片サイズが小さくなるほど強度が向上する。ここで、金属におけるこのような寸法効果は、多結晶と単結晶でそれぞれ異なるメカニズムにより発生する。多結晶材料で見られる寸法効果は主に結晶粒界の存在に起因したものであり、一般にHall-Petchの関係として結晶粒の大きさと材料強度の関係が知られている<sup>(71)</sup>。一方、単結晶材料における寸法効果の原因を大別すると(i)境界条件、実験条件に依存して材料内部にひずみこう配が存在し、そこに蓄積する転位が作る内部応力(背応力)場が転位源に逆力を及ぼすことで生じるもの<sup>(72)</sup>と(ii)転位源の枯渇、転位源長さの試験片寸法依存性<sup>(73)</sup>に関連するものの2つが考えられる。単結晶材料におけるこのような寸法効果は主に試験片サイズが100 nm~50 μmの範囲で現れ、MEMS等の微小構造物の変形挙動を正確に理解する上で極めて重要な現象である。上述した高次理論では、多結晶および単結晶における(i)の原因による寸法効果を特性長の観点から表現可能である。また、従来の連続体理論では変位と表面力に対する境界条件が必要となるが、高次理論ではそれらに加えてひずみあるいはすべりの境界条件も要請される。実現現象としては、すべりに対する境界条件は粒界における転位の蓄積に関連するため、それに伴う背応力場形成を高次理論を用いることで表現可能と考えられる。また、高次理論には、多結晶における結晶粒界の境界条件を実現現象に即してより正確に設定できるという利点もある。

以上のように、高次理論に基づく定式化を行うことで数値解析のメッシュ依存性の軽減ならび

に寸法効果の表現を期待でき、また結晶粒界におけるすべりの境界条件の適切な設定が可能となる。そこで本研究では、LPSO相の変形に適した転位-結晶塑性モデルを高次理論の体系に基づいて構築する。また、寸法効果に関しては、上述の単結晶における(i)の表現を試みる。

## 1.5 本研究の目的

本研究では、Mg基LPSO相におけるキンク帯形成を数値解析的に再現することを目的とし、キンク帯形成のメッシュ依存性の軽減を念頭においてLPSO相に適した材料モデルを構築する。その際、LPSO相の変形異方性を簡便に表現でき、かつ変形抵抗を転位密度に基づいて材料科学的に導入可能な転位-結晶塑性モデルを採用し、そのモデルを高次理論の体系で拡張する。また、材料科学的見地から高次応力の構成式に特性長の概念を取り入れるとともに、従来のモデルを内包する形で新たな高次モデルを構築する。

続いて、構築した理論に基づいたFEM解析をLPSO相の単結晶および多結晶に対して実施する。まず単結晶に対する解析では、図1.8に示すような板状のLPSO相を二次元の短冊として簡単にモデル化する。そして、図1.18のキンク帯形成モデルと整合するような初期方位を設定したうえで圧縮解析を行う。ここで、LPSO相における特性長の具体的な値は現在までに報告されていないため、本研究ではまず特性長を様々な値に変化させて解析を行い、構築した材料モデルの特性を評価する。その際、前述のように従来の理論に基づくFEM解析<sup>(54)</sup>ではLPSO相のキンク帯形成において応力-ひずみ曲線や結晶格子の回転の大きさ等にメッシュ依存性が見られることから、それらの値の観点からキンク帯形成のメッシュ依存性を評価する。続いて、特性長がキンク帯形成に与える影響に注目し、その値と形成するキンクの関係を考察する。また、前述のように高次理論に基づいて構築したモデルは寸法効果を有すると予想されるため、その有無を様々なサイズの試験片に対する数値解析を行うことで調査する。

多結晶に対する解析では、高次理論で新たに導入される結晶粒界におけるすべりの境界条件が変形に与える影響を検討する。ここで、前述のようにLPSO型Mg合金におけるキンク帯強化はLPSO相と $\alpha$ -Mg相の双方と関連しているため、合金全体の変形挙動を再現するためには $\alpha$ -Mg相を考慮しなければならない。しかしながら、1.1.2項で述べたように $\alpha$ -Mg相では純Mgと同様に $\{10\bar{1}2\} \langle \bar{1}011 \rangle$ 双晶変形が生じるため、 $\alpha$ -Mg相を解析対象とする場合にはそのモデル化が別途必要となる。双晶モデルの例としてPhase-field法による双晶組織形成モデル<sup>(74)</sup>が近年構築されており、このモデルでは双晶界面の拡散方程式を材料の変形に対する転位-結晶塑性モデルと連成して解いている。ただし、高次理論では非局所の物理量が新たに導入されるため、それに加えて双晶に対する支配方程式を新たに考慮するには理論体系が非常に複雑なものとなる。そこで本研究では、簡単のために $\alpha$ -Mg相を無視し、LPSO相単相の多結晶に対する解析を実施することとする。その際、解析対象には図1.10に示すLPSO単相で構成される一方向凝固多結晶材を想定する。この材料においてもキンク帯が形成すると報告されているため<sup>(27)</sup>、本研究では粒界におけるすべりの境界条件がLPSO相多結晶中のキンク変形に及ぼす影響を背応力場形成の観点から検討する。

また、前述のように回位を用いることでより巨視的な立場からキンク帯を捉えることができる。これにより計算力学的にはキンク帯形成に対してよりマクロなモデリングを行うことが可能とな

り、計算コスト削減につながると期待される。そこで、本研究ではキンク帯形成の転位による表現のみならず回位による表現についても行うこととする。

以上をまとめると本研究の目的は次の4つに分類される。

- (1) Mg基LPSO相におけるキンク帯形成FEM解析のメッシュ依存性の軽減を念頭において高次応力を考慮した転位-結晶塑性モデルを構築する。
- (2) 構築したモデルを用いて短冊状のLPSO相単結晶に対する二次元FEM解析を実施し、キンク帯形成のメッシュ依存性を応力-ひずみ線図、形成したキンク帯の幅および転位密度などの諸量の値の観点から評価する。また、キンク帯形成における特性長の役割および構築したモデルの寸法効果の有無を検討する。
- (3) LPSO相多結晶に対する二次元FEM解析を実施し、結晶粒界におけるすべりの境界条件が変形に与える影響を背応力場形成の観点から考察する。
- (4) キンク帯を特徴づける回位四重極構造の表現手法を構築する。

## 1.6 本論文の構成

本論文の構成について述べる。

第2章では、本研究で用いる運動学について論じている。まず、金属材料の大変形状態を記述するために配置の概念を導入し、各配置におけるひずみを定義している。また、速度こう配の弾塑性分解を各配置において行い、それらの量とひずみ速度の関連性を述べている。続いて、結晶塑性論における諸量の配置変換則を与えている。さらに、材料内部に蓄積する転位密度の結晶塑性論的表現方法を論じ、孤立転位および転位対の密度の表現にはそれぞれ個別の量の定義が必要であることを示している。また、それにともないGN(geometrically necessary)転位密度およびSS(statistically stored)転位密度の発展式をそれぞれすべり速度こう配およびすべり速度に対応する量として定義している。

第3章では、高次応力をGN転位密度に共役な力として全自由エネルギーに導入している。また、仮想仕事の原理に基づいて高次理論における各種保存則を導出し、釣合い方程式から高次応力の発散が背応力となることを示している。また、Clausius-Duhemの不等式から応力および高次応力の構成式の一般形を導くとともに、それらの構成式に対する熱力学的制限について述べている。

第4章では、速度形の弾粘塑性構成式および高次応力の構成式を熱力学的に導出している。その際、高次応力にはGN転位の分布に関連した特性長が含まれることを示している。また、SS転位密度の表現をすべり面の曲率依存形に拡張することで従来の転位-結晶塑性論における硬化則を高次理論に適する形に修正している。さらに、本モデルに対する従来の転位-結晶塑性モデルの位置づけを説明している。

第5章では、3章で示した仮想仕事の原理を速度形に拡張している。また、高次理論において新たに導入される境界条件について言及し、高次応力に対する境界条件がGN転位密度の境界条件に対応することを述べている。

第6章では、有限要素法による数値解析を行うために5章で導出した仮想仕事の原理を離散化している。加えて、数値計算の低コスト化・安定化を実現するための手法を導入している。



第7章では、本モデルを用いたMg基LPSO相に対するFEM解析の結果およびそれに対する考察を述べている。まず、キンク変形が生じやすい初期方位を設定した短冊状の単結晶に対する解析を行い、キンク帯形成のメッシュ依存性を特性長と試験片寸法の比（スケール比）の観点から検討している。そして、高次応力の導入によるキンク帯形成過程について議論するとともに、キンク帯の幅が特性長に応じて変化することを示している。また、本モデルにより寸法効果を表現可能なことを明らかにしている。続いて多結晶に対する解析を実施し、結晶粒界におけるすべり速度の境界条件が変形に及ぼす影響をGN転位蓄積およびそれにとまなう背応力場形成に基づいて検討している。また、粒界における非底面系の活動にも言及している。最後に、キンク帯を特徴づける回位四重極構造の表現方法について述べ、すべりの不適合度を用いて回位密度分布を簡易的に表現できることを示している。

第8章は結言であり、本研究で構築したモデルの性質およびFEM解析から得た知見を要約している。

## 1.7 本論文で用いる記号

本論文では特に断りのないかぎり物理量を表すスカラを斜字体の細字で、ベクトルを斜字体の小文字の太字で、2階以上のテンソルを斜字体の大文字の太字で表す。そして、初期配置、第1中間配置、第2中間配置および現配置を表す記号をそれぞれ $\beta_{(I)}$ 、 $\beta_{(M)}$ 、 $\beta_{(m)}$ および $\beta_{(c)}$ とする。また、任意のベクトルおよびテンソル( $\bullet$ )の配置表示記号を次のように表わす。

初期配置	: ( $\bullet$ ) <sub>(I)</sub>
第1中間配置	: ( $\bullet$ ) <sub>(M)</sub>
第2中間配置	: ( $\bullet$ ) <sub>(m)</sub>
現配置	: ( $\bullet$ ) <sub>(c)</sub> = ( $\bullet$ )

なお、特に断りのない限り配置記号のないものは現配置における量を表すこととする。

ベクトルおよびテンソルの成分表示に関しては、斜字体のラテンまたはギリシャ添字を付して $a_i, b_i, c_i, \dots, A_{ij}, B_{ij}, C_{ij}, \dots$ のように表記する。ただし、初期配置 $\beta_{(I)}$ の量は太字のラテン添字 $I, J, \dots$ 、第1中間配置 $\beta_{(M)}$ の量は小文字のギリシャ添字 $\alpha, \beta, \dots$ 、第2中間配置 $\beta_{(m)}$ の量は小文字のギリシャ添字 $\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \dots$ 、現配置 $\beta_{(c)}$ の量は小文字のラテン添字 $i, j, \dots$ で表す。

また、線形変換、空間に関する微分の関係は後形記法で表し、直接表示および指標表示による線形変換、内積、外積、テンソル積および2重積をそれぞれ次のように表す。

	直接表示	指標表示	nonion 表示
線形変換	: $\mathbf{A}\mathbf{B}$	, $A_{ik}B_{kj}$	, $A_{ik}B_{kj}\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$
内積	: $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$	, $A_{ij}B_{ij}$	, $A_{ij}B_{ij}$
外積	: $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$	, $A_{il}e_{jlm}B_{mk}$	, $A_{il}e_{jlm}B_{mk}\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k$
テンソル積	: $\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$	, $A_{ij}B_{kl}$	, $(A_{ij}\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \otimes (B_{kl}\mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l)$
2重積	: $\mathbf{D} : \mathbf{B}$	, $D_{ijkl}B_{kl}$	, $D_{ijkl}B_{kl}(\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j)$

ここで、 $e_{ijk}$ は交代記号である。さらに、こう配、発散および回転の微分演算は直接表示および指標表示により次のように表す。

	直接表示	指標表示	nonion 表示
こう配	: $\text{grad } \mathbf{A} = \mathbf{A} \otimes \bar{\nabla}$	, $A_{ij,k}$	, $A_{ij,k}\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k$
発散	: $\text{div } \mathbf{A} = \bar{\nabla} \cdot \mathbf{A}$	, $A_{ij,j}$	, $A_{ij,j}\mathbf{e}_i$
回転	: $\text{curl } \mathbf{A} = -\mathbf{A} \times \bar{\nabla}$	, $A_{il,k}e_{jkl}$	, $A_{il,k}e_{jkl}\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$

ここで、記号 $(\bullet)_{,i}$ は座標 $x_i$ に関する微分を表す。また、慣例に従って初期配置 $\beta_{(I)}$ におけるこう配、発散および回転の微分表記をそれぞれGrad、DivおよびCurlと記す。

最後に、本論文では総和規約を適用し、1つの項に同じ指標が2つ現れる場合は総和記号を省略する。例えば、 $\sum_{j=1}^3 A_{ij}b_j = A_{ij}b_j$ のように総和記号 $\sum_{j=1}^3$ は表記しない。

## 2章

# 運動学

本章では、転位-結晶塑性論における運動学を従来の結晶塑性論に基づいて述べる。その際、速度形構成式に用いられるスピンと熱力学的に整合する中間配置を構成式の参照配置にとるために、Shizawa-Zbib<sup>(75)</sup>に代表される第2中間配置 (Isoclinic 配置)<sup>(76)</sup>の導入による4配置構成を用いる。また、第2中間配置において回復可能なひずみ尺度と回復不可能な変形尺度が存在することを示す。さらに、結晶塑性論における塑性速度こう配、塑性変形速度、塑性スピンの定義を示し、各量の配置変換則について述べる。

続いて、金属材料内に蓄積する転位密度の表現方法について述べ、孤立転位密度を表現するGN転位密度および転位対密度を表現するSS転位密度の定義を結晶塑性論に適した形で行う。

### 2.1 4配置構成による変形こう配の分解

有限変形を記述する場合、構成式は後述するように客観速度を用いて表される。結晶塑性論では一般的に下部構造スピン<sup>(77)</sup>:  $\mathbf{W}^* \equiv \mathbf{W} - \mathbf{W}^p$ が共回転速度に用いられるため、本研究ではShizawa-Zbib<sup>(75)</sup>に代表される理論に基づいて図2.1に示すような第2中間配置 (Isoclinic 配置)を含む4配置構成を導入する。ここで、 $\mathbf{W}$ および $\mathbf{W}^p$ はそれぞれ連続体スピンおよび塑性スピンである。

まず、変形こう配 $\mathbf{F}$ を次のように分解することを考える。

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}^m \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p \dots\dots\dots (2.1)$$

ここで、 $\mathbf{R}^m$ は剛体回転を表す直交テンソル、 $\mathbf{F}^e$ および $\mathbf{F}^p$ はそれぞれ弾性変形こう配および塑性変形こう配である。このとき、連続体スピン $\mathbf{W}$ は式(2.1)を用いると次式のように書ける。

$$\mathbf{W} = \mathbf{L}_A = \left( \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} \right)_A = \mathbf{W}^m + \mathbf{W}^e + \mathbf{W}^p \dots\dots\dots (2.2)$$

ここで、 $\mathbf{L}$ は後述する速度こう配であり、 $(\dot{\bullet})$ 、 $(\bullet)^{-1}$ および $(\bullet)_A$ はそれぞれ任意のテンソル量 $(\bullet)$ の物質時間導関数、インバースおよび反対称部分を表す。また、 $\mathbf{W}^m$ 、 $\mathbf{W}^e$ および $\mathbf{W}^p$ はそれぞれ剛体スピン、弾性スピンおよび塑性スピンであり、その具体形は式(2.1)および式(2.2)より

$$\mathbf{W}^m = \dot{\mathbf{R}}^m \mathbf{R}^{mT} \dots\dots\dots (2.3)$$

$$\mathbf{W}^e = \mathbf{R}^m \left( \dot{\mathbf{F}}^e \mathbf{F}^{e-1} \right)_A \mathbf{R}^{mT} \dots\dots\dots (2.4)$$

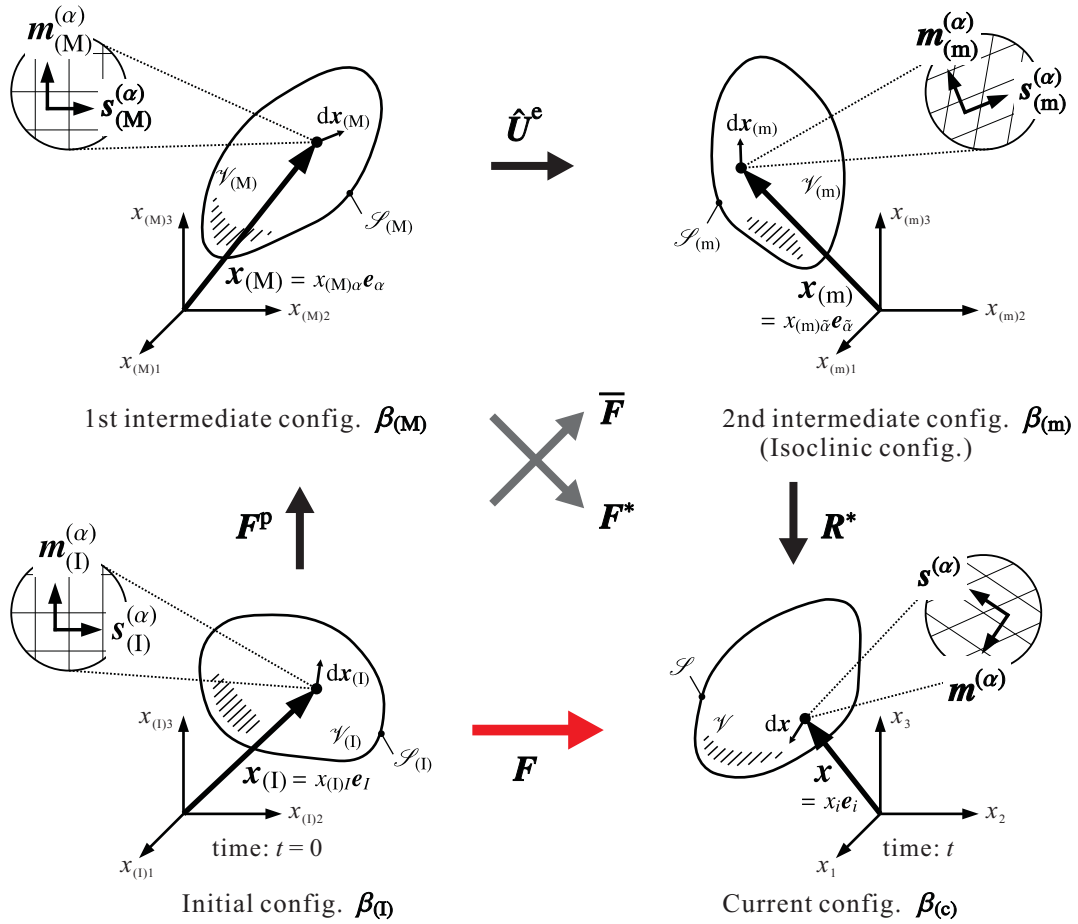


Fig. 2.1 Configurations depicting large deformation<sup>(75)</sup>.

$$\mathbf{W}^p = \mathbf{R}^m (\dot{\mathbf{F}}^e \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{F}^{e-1})_{\mathbf{A}} \mathbf{R}^{mT} \dots (2.5)$$

となる. ただし,  $(\bullet)^T$  は任意のテンソル量  $(\bullet)$  の転置を表す. ここで, 反対称テンソル  $(\dot{\mathbf{F}}^e \mathbf{F}^{e-1})_{\mathbf{A}}$  は, ある直交テンソル  $\hat{\mathbf{R}}^e$  を用いて次のように表すことができ,

$$(\dot{\mathbf{F}}^e \mathbf{F}^{e-1})_{\mathbf{A}} \equiv \dot{\hat{\mathbf{R}}}^e \hat{\mathbf{R}}^{eT} \dots (2.6)$$

この  $\hat{\mathbf{R}}^e$  と  $\dot{\hat{\mathbf{R}}}^e$  に対応するストレッチ  $\hat{\mathbf{U}}^e$  を用いて  $\mathbf{F}^e$  は次のように分解できる.

$$\mathbf{F}^e = \hat{\mathbf{R}}^e \hat{\mathbf{U}}^e \dots (2.7)$$

ここで,  $(\dot{\mathbf{F}}^e \mathbf{F}^{e-1})_{\mathbf{A}}$  を  $\mathbf{F}^e$  の通常の右極分解により得られる直交テンソル  $\mathbf{R}^e$  および右弾性ストレッチ  $\mathbf{U}^e$  (すなわち,  $\mathbf{F}^e = \mathbf{R}^e \mathbf{U}^e$ ) を用いて表せば

$$(\dot{\mathbf{F}}^e \mathbf{F}^{e-1})_{\mathbf{A}} = \dot{\mathbf{R}}^e \mathbf{R}^{eT} + \mathbf{R}^e (\dot{\mathbf{U}}^e \mathbf{U}^{e-1})_{\mathbf{A}} \mathbf{R}^{eT} \dots (2.8)$$

と書けるため, 式(2.8)と式(2.6)を比較すれば  $\hat{\mathbf{U}}^e$  は弾性スピンに一切寄与しない弾性ストレッチ

であるといえる．すなわち，

$$(\dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1})_A = \mathbf{0} \dots\dots\dots (2.9)$$

である．この  $\hat{R}^e$  および  $\hat{U}^e$  を用いると，下部構造スピン  $W^*$  はその定義および式(2.2)より

$$W^* \equiv W - W^p = W^m + W^e = \dot{\hat{R}}^* R^{*T} \dots\dots\dots (2.10)$$

と書ける．ただし， $R^*$  は

$$R^* \equiv R^m \hat{R}^e \dots\dots\dots (2.11)$$

と定義される直交テンソルであり，式(2.11)のように純粋な剛体回転および弾性変形にともなう回転を含む．したがって，式(2.7)および式(2.11)を式(2.1)に代入すれば4配置構成における変形こう配  $F$  は次のように分解できる．

$$F = R^* \hat{U}^e F^p = R^* \bar{F} = F^* F^p \dots\dots\dots (2.12)$$

ここで， $\bar{F} \equiv \hat{U}^e F^p$  および  $F^* \equiv R^* \hat{U}^e$  である．式(2.12)は初期配置  $\beta_{(l)}$  から現配置  $\beta_{(c)}$  への変形過程を次のように分解することを表している．まず，初期配置  $\beta_{(l)}$  から塑性変形こう配  $F^p$  により第1中間配置  $\beta_{(M)}$  へ写像される．ここで，本研究では塑性変形の素過程はすべり変形と考えるため， $F^p$  による写像では図2.1中に示した結晶格子の向きは不変であり格子自体に変形は生じない．次に，弾性ストレッチ  $\hat{U}^e$  により第1中間配置  $\beta_{(M)}$  から第2中間配置  $\beta_{(m)}$  へと進む．ここでは，式(2.8)右辺第2項のようなスピンを生じないように定義されたストレッチによる弾性変形を表している．したがって，格子は弾性主軸に対して引張ならびに圧縮変形を受ける．最後に， $R^*$  により第2中間配置  $\beta_{(m)}$  から現配置  $\beta_{(c)}$  に写像される．ここで， $R^*$  により格子は剛体回転および弾性的な回転を受ける．また， $F$  の行列式は次のように書ける．

$$J \equiv \det F = \det (R^* \hat{U}^e F^p) = (\det R^*) (\det \hat{U}^e) (\det F^p) = J^* J^e J^p = J^e \dots\dots\dots (2.13)$$

ただし，

$$J^* \equiv \det R^* = 1, \quad J^e \equiv \det \hat{U}^e, \quad J^p \equiv \det F^p = 1 \dots\dots\dots (2.14)$$

である．ここで，式(2.14)<sub>3</sub> は塑性変形が結晶格子の相対的なすべりによってのみ生じるため体積変化は発生しないことを考慮している．また，式(2.14)<sub>1</sub> のように  $R^*$  は直交テンソルであるため，その行列式は恒等的に  $\det R^* = 1$  となる．

また，図2.1中に示した  $s^{(\alpha)}$  および  $m^{(\alpha)}$  は各配置における結晶基底であり，それぞれすべり方向単位ベクトルおよびすべり面法線方向単位ベクトルを表している．ただし， $(\bullet)^{(\alpha)}$  は  $\alpha$  活動すべり系に関する量である．初期配置  $\beta_{(l)}$  から第1中間配置  $\beta_{(M)}$  への写像は図2.2に示すように結晶の相対的なすべり変形を表すため，結晶基底の大きさおよび方向は変化しない．すなわち，

$$s_{(M)}^{(\alpha)} = s_{(l)}^{(\alpha)}, \quad m_{(M)}^{(\alpha)} = m_{(l)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.15)$$

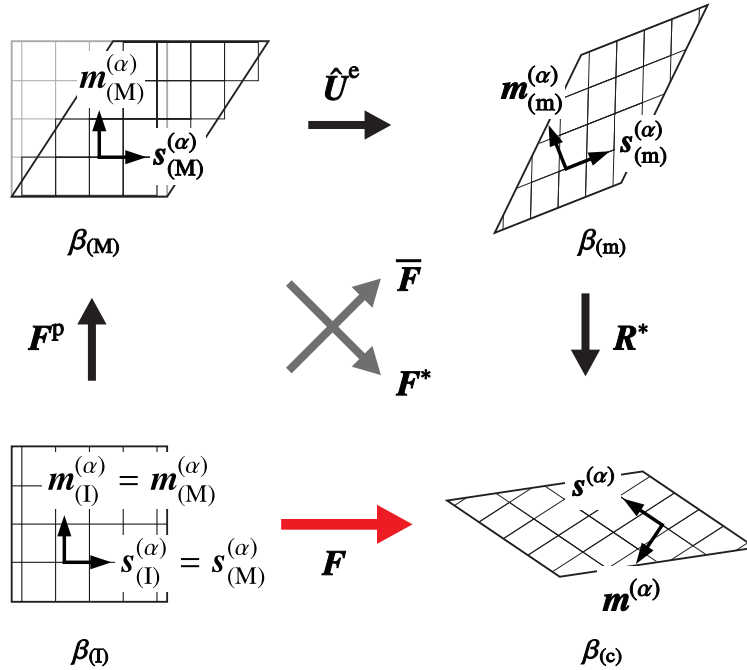


Fig. 2.2 Crystal grids deformed by crystallographic slip and other process.

である．次に，第1中間配置  $\beta_{(M)}$  から第2中間配置  $\beta_{(m)}$  への写像は弾性ストレッチによる変形であるため，結晶基底の大きさおよび方向が変化する．さらに，第2中間配置  $\beta_{(m)}$  から現配置  $\beta_{(c)}$  までは剛体・弾性回転を受けて結晶基底の向きのみが変化する．

また，第2中間配置から現配置への写像  $R^*$  は直交テンソルであるため，任意のベクトル  $\underline{a}_{(m)}$  および2階のテンソル  $\underline{A}_{(m)}$  はそれぞれ  $\underline{a}_{(m)} = R^{*\text{T}} \underline{a}$  および  $\underline{A}_{(m)} = R^{*\text{T}} \underline{A} R^*$  のように配置変換される．したがって，それらの物質時間微分はそれぞれ

$$\dot{\underline{a}}_{(m)} = R^{*\text{T}} \overset{\nabla}{\dot{\underline{a}}} \dots \dots \dots (2.16)$$

$$\dot{\underline{A}}_{(m)} = R^{*\text{T}} \overset{\nabla}{\dot{\underline{A}}} R^* \dots \dots \dots (2.17)$$

と表すことができる．ただし，上式の右辺に現れる各速度はそれぞれ

$$\overset{\nabla}{\dot{\underline{a}}} \equiv \dot{\underline{a}} - W^* \underline{a} \dots \dots \dots (2.18)$$

$$\overset{\nabla}{\dot{\underline{A}}} \equiv \dot{\underline{A}} - W^* \underline{A} + \underline{A} W^* \dots \dots \dots (2.19)$$

と定義される下部構造スピンを共回転スピんに選んだ客観性を有する速度であり [補足 A.1 参照]，特に式(2.19)の客観速度は Mandel-Kratovichil 速度<sup>(77)</sup> と呼ばれる．以上より，構成式の参照配置として  $\beta_{(m)}$  を採用すれば，共回転速度のスピンの  $W^*$  となるのがわかる．

なお，任意のベクトル量およびテンソル量の参照配置-現配置間の配置変換操作は一般に”push-forward operation”および”pull-back operation”と呼ばれる<sup>(78)(79)</sup>．”push-forward operation”は参照配置におけるベクトル量あるいはテンソル量の現配置への変換を表し，一方で”pull-back operation”は現配置におけるそれらの量の参照配置への変換に対応する．すなわち，前述の  $\underline{a}_{(m)} = R^{*\text{T}} \underline{a}$  およ

び  $\underline{\mathbf{A}}_{(m)} = \mathbf{R}^{*\text{T}} \underline{\mathbf{A}} \mathbf{R}^*$  は  $\underline{\mathbf{a}}$  および  $\underline{\mathbf{A}}$  の第2中間配置への pull-back, その逆変換を表す  $\underline{\mathbf{a}} = \mathbf{R}^* \underline{\mathbf{a}}_{(m)}$  および  $\underline{\mathbf{A}} = \mathbf{R}^* \underline{\mathbf{A}}_{(m)} \mathbf{R}^{*\text{T}}$  は  $\underline{\mathbf{a}}_{(m)}$  および  $\underline{\mathbf{A}}_{(m)}$  の現配置への push-forward の操作をそれぞれ表す.

## 2.2 ひずみの弾塑性分解

本節では, 物体の大変形問題の記述に適したひずみの定義を各配置に対して行い, その配置間の変換則を述べる.

### 2.2.1 ひずみの定義

図 2.1 に示す各配置における微小線素は次式のような配置変換則に従う.

$$\mathbf{dx} = \mathbf{R}^* \mathbf{dx}_{(m)} = \mathbf{F}^* \mathbf{dx}_{(M)} = \mathbf{F} \mathbf{dx}_{(I)} \dots \dots \dots (2.20)$$

$$\mathbf{dx}_{(m)} = \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{dx}_{(M)} = \bar{\mathbf{F}} \mathbf{dx}_{(I)} \dots \dots \dots (2.21)$$

$$\mathbf{dx}_{(M)} = \mathbf{F}^p \mathbf{dx}_{(I)} \dots \dots \dots (2.22)$$

本研究では, 式 (2.20)~式 (2.22) の関係を用いて微小線素  $\mathbf{dx}$  および  $\mathbf{dx}_{(I)}$  の二乗差により弾性ひずみおよび塑性ひずみを定義する. 図 2.1 の4配置構成を用いてひずみを Lagrange 的に表示する場合, 弾性ひずみおよび塑性ひずみの参照配置はそれぞれ第1中間配置  $\beta_{(M)}$  および初期配置  $\beta_{(I)}$  となることを考慮すれば, 微小線素の二乗差は次のように変形できる.

$$\begin{aligned} \mathbf{dx} \cdot \mathbf{dx} - \mathbf{dx}_{(I)} \cdot \mathbf{dx}_{(I)} &= (\mathbf{dx} \cdot \mathbf{dx} - \mathbf{dx}_{(M)} \cdot \mathbf{dx}_{(M)}) + (\mathbf{dx}_{(M)} \cdot \mathbf{dx}_{(M)} - \mathbf{dx}_{(I)} \cdot \mathbf{dx}_{(I)}) \\ &= (\mathbf{F}^* \mathbf{dx}_{(M)} \cdot \mathbf{F}^* \mathbf{dx}_{(M)} - \mathbf{dx}_{(M)} \cdot \mathbf{dx}_{(M)}) + (\mathbf{F}^p \mathbf{dx}_{(I)} \cdot \mathbf{F}^p \mathbf{dx}_{(I)} - \mathbf{dx}_{(I)} \cdot \mathbf{dx}_{(I)}) \\ &= (\mathbf{F}^{*\text{T}} \mathbf{F}^* - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{dx}_{(M)} \otimes \mathbf{dx}_{(M)} + (\mathbf{F}^{p\text{T}} \mathbf{F}^p - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{dx}_{(I)} \otimes \mathbf{dx}_{(I)} \\ &= 2\mathbf{E}_{(M)}^e \cdot \mathbf{dx}_{(M)} \otimes \mathbf{dx}_{(M)} + 2\mathbf{E}_{(I)}^p \cdot \mathbf{dx}_{(I)} \otimes \mathbf{dx}_{(I)} \dots \dots \dots (2.23) \end{aligned}$$

ここで,  $\mathbf{E}_{(M)}^e$  および  $\mathbf{E}_{(I)}^p$  はそれぞれ Lagrange 的に表示した弾性ひずみおよび塑性ひずみであり, それぞれ次式のように定義される.

$$\mathbf{E}_{(M)}^e \equiv \frac{1}{2} (\mathbf{F}^{*\text{T}} \mathbf{F}^* - \mathbf{I}) = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{U}}^{e\text{T}} \hat{\mathbf{U}}^e - \mathbf{I}) \dots \dots \dots (2.24)$$

$$\mathbf{E}_{(I)}^p \equiv \frac{1}{2} (\mathbf{F}^{p\text{T}} \mathbf{F}^p - \mathbf{I}) \dots \dots \dots (2.25)$$

また, 式 (2.20)~式 (2.22) を式 (2.23) に代入すれば, 各配置における弾性ひずみはそれぞれ次式のように定義できる [補足 A.2 参照].

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{E}_{(I)}^e &\equiv \frac{1}{2} (\mathbf{F}^{\text{T}} \mathbf{F} - \mathbf{F}^{p\text{T}} \mathbf{F}^p), & \mathbf{E}_{(m)}^e &\equiv \frac{1}{2} (\mathbf{I} - \hat{\mathbf{U}}^{e-\text{T}} \hat{\mathbf{U}}^{e-1}), \\ \mathbf{E}^e &\equiv \frac{1}{2} (\mathbf{I} - \mathbf{F}^{*\text{T}} \mathbf{F}^{*-1}) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (2.26)$$

同様に、各配置における塑性ひずみはそれぞれ次式のように定義できる。

$$\left. \begin{aligned} E_{(M)}^p &\equiv \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \mathbf{F}^{p-T} \mathbf{F}^{p-1}), & E_{(m)}^p &\equiv \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} - \bar{\mathbf{F}}^{-T} \bar{\mathbf{F}}^{-1}), \\ E^p &\equiv \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{*-T} \mathbf{F}^{*-1} - \mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^{-1}) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (2.27)$$

なお、式(2.23)は

$$\mathbf{dx} \cdot \mathbf{dx} - \mathbf{dx}_{(I)} \cdot \mathbf{dx}_{(I)} = \mathbf{F} \mathbf{dx}_{(I)} \cdot \mathbf{F} \mathbf{dx}_{(I)} - \mathbf{dx}_{(I)} \cdot \mathbf{dx}_{(I)} = (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{dx}_{(I)} \otimes \mathbf{dx}_{(I)} = 2\mathbf{E}_{(I)} \cdot \mathbf{dx}_{(I)} \otimes \mathbf{dx}_{(I)}. \quad (2.28)$$

と表すこともでき、

$$\mathbf{E}_{(I)} \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I}) \dots\dots\dots (2.29)$$

は全変形に対する Green-Lagrange ひずみ<sup>(80)</sup>となる。一方、式(2.23)を

$$\mathbf{dx} \cdot \mathbf{dx} - \mathbf{dx}_{(I)} \cdot \mathbf{dx}_{(I)} = \mathbf{dx} \cdot \mathbf{dx} - \mathbf{F}^{-1} \mathbf{dx} \cdot \mathbf{F}^{-1} \mathbf{dx} = (\mathbf{I} - \mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^{-1}) \cdot \mathbf{dx} \otimes \mathbf{dx} = 2\mathbf{E} \cdot \mathbf{dx} \otimes \mathbf{dx} \dots\dots\dots (2.30)$$

と表せば、

$$\mathbf{E} \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^{-1}) \dots\dots\dots (2.31)$$

は全変形に対する Almansi-Euler ひずみ<sup>(80)</sup>となる。本項で定義した式(2.24)～式(2.27)の各配置におけるひずみ量は、式(2.29)および式(2.31)などで表される全ひずみを弾塑性分解した結果である。

### 2.2.2 ひずみの配置変換則

式(2.26)および式(2.27)で示した各配置における弾性ひずみおよび塑性ひずみはそれぞれ次式の関係をもつ。

$$\mathbf{E}^e \cdot \mathbf{dx} \otimes \mathbf{dx} = \mathbf{E}_{(m)}^e \cdot \mathbf{dx}_{(m)} \otimes \mathbf{dx}_{(m)} = \mathbf{E}_{(M)}^e \cdot \mathbf{dx}_{(M)} \otimes \mathbf{dx}_{(M)} = \mathbf{E}_{(I)}^e \cdot \mathbf{dx}_{(I)} \otimes \mathbf{dx}_{(I)} \dots\dots\dots (2.32)$$

$$\mathbf{E}^p \cdot \mathbf{dx} \otimes \mathbf{dx} = \mathbf{E}_{(m)}^p \cdot \mathbf{dx}_{(m)} \otimes \mathbf{dx}_{(m)} = \mathbf{E}_{(M)}^p \cdot \mathbf{dx}_{(M)} \otimes \mathbf{dx}_{(M)} = \mathbf{E}_{(I)}^p \cdot \mathbf{dx}_{(I)} \otimes \mathbf{dx}_{(I)} \dots\dots\dots (2.33)$$

式(2.32)に式(2.20)および式(2.21)を代入すれば、弾性ひずみの配置変換則が次のように得られる。

$$\mathbf{E}^e = \mathbf{R}^* \mathbf{E}_{(m)}^e \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{F}^{*-T} \mathbf{E}_{(M)}^e \mathbf{F}^{*-1}, \quad \mathbf{E}_{(m)}^e = \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \mathbf{E}_{(M)}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \dots\dots\dots (2.34)$$

ただし、本研究の理論展開において初期配置 $\beta_{(I)}$ における弾性ひずみ $\mathbf{E}_{(I)}^e$ は不要であるため、その配置変換は省略する。同様に式(2.33)に式(2.20)～式(2.22)を代入すれば、塑性ひずみの配置変換則が次のように得られる。

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{E}^p &= \mathbf{R}^* \mathbf{E}_{(m)}^p \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{F}^{*-T} \mathbf{E}_{(M)}^p \mathbf{F}^{*-1} = \mathbf{F}^{-T} \mathbf{E}_{(I)}^p \mathbf{F}^{-1}, \\ \mathbf{E}_{(m)}^p &= \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \mathbf{E}_{(M)}^p \hat{\mathbf{U}}^{e-1} = \bar{\mathbf{F}}^{-T} \mathbf{E}_{(I)}^p \bar{\mathbf{F}}^{-1}, \\ \mathbf{E}_{(M)}^p &= \mathbf{F}^{p-T} \mathbf{E}_{(I)}^p \mathbf{F}^{p-1} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (2.35)$$

なお、弾性ひずみおよび塑性ひずみは共変テンソルであるため<sup>(79)(81)</sup>、式(2.34)および式(2.35)のように共変的な配置変換を受けることがわかる。



## 2.3 速度こう配の弾塑性分解

本節では、各配置における速度こう配の定義を行い、その配置変換則を述べる。また、速度こう配の加算分解および Descartes 分解により速度こう配、変形速度およびスピンの弾塑性分解を行う。

### 2.3.1 速度こう配の定義

現配置  $\beta_{(c)}$  における速度こう配  $\mathbf{L}$  は、式 (2.20) の物質時間微分をとることで次のように定義される<sup>(79)</sup>。

$$d\mathbf{v} = \dot{\mathbf{F}}d\mathbf{x}_{(l)} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1}d\mathbf{x} = \mathbf{L}d\mathbf{x}, \quad \mathbf{L} \equiv \text{grad } \mathbf{v} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} \dots (2.36)$$

ただし、 $d\mathbf{v} = d\dot{\mathbf{x}}$  である。同様に式 (2.21) および式 (2.22) の物質時間微分をとれば、各配置における速度こう配が次のように得られる。

$$d\mathbf{v}_{(m)} = \dot{\bar{\mathbf{F}}}d\mathbf{x}_{(l)} = \dot{\bar{\mathbf{F}}}\bar{\mathbf{F}}^{-1}d\mathbf{x}_{(m)} = \mathbf{L}_{(m)}d\mathbf{x}_{(m)}, \quad \mathbf{L}_{(m)} \equiv \dot{\bar{\mathbf{F}}}\bar{\mathbf{F}}^{-1} \dots (2.37)$$

$$d\mathbf{v}_{(M)} = \dot{\mathbf{F}}^p d\mathbf{x}_{(l)} = \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} d\mathbf{x}_{(M)} = \mathbf{L}_{(M)}d\mathbf{x}_{(M)}, \quad \mathbf{L}_{(M)} \equiv \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \dots (2.38)$$

ここで、速度こう配はその指標に共変成分と反変成分を有する混合テンソルとなるため<sup>(79)(81)</sup>、配置変換則は次式に従う。

$$\mathbf{L} = \mathbf{R}^* \mathbf{L}_{(m)} \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{F}^* \mathbf{L}_{(M)} \mathbf{F}^{*-1}, \quad \mathbf{L}_{(m)} = \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{L}_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \dots (2.39)$$

また、式 (2.12) を式 (2.36) に代入すると  $\mathbf{L}$  は次のように表せる。

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = (\mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^p)^{\cdot} (\mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^p)^{-1} = (\dot{\mathbf{R}}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^p + \mathbf{R}^* \dot{\hat{\mathbf{U}}}^e \mathbf{F}^p + \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^p) \mathbf{F}^{p-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \\ &= \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} + \mathbf{R}^* \dot{\hat{\mathbf{U}}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} + \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \\ &= \mathbf{L}^e + \mathbf{L}^p \dots (2.40) \end{aligned}$$

ここで、式 (2.40) の最後の等式は  $\mathbf{L}$  の弾塑性分解を表しており、 $\mathbf{L}^e$  および  $\mathbf{L}^p$  はそれぞれ次式で定義される現配置における弾性速度こう配および塑性速度こう配である。

$$\mathbf{L}^e \equiv \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} + \mathbf{R}^* \dot{\hat{\mathbf{U}}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} = \dot{\mathbf{F}}^* \mathbf{F}^{*-1} \dots (2.41)$$

$$\mathbf{L}^p \equiv \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{F}^* \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{F}^{*-1} \dots (2.42)$$

したがって、式 (2.39) より各配置における弾性速度こう配および塑性速度こう配はそれぞれ次のように与えられる。

$$\mathbf{L}_{(m)}^e = \mathbf{R}^{*T} \mathbf{L}^e \mathbf{R}^* = \mathbf{R}^{*T} \dot{\mathbf{R}}^* + \dot{\hat{\mathbf{U}}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \dots (2.43)$$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{L}_{(m)}^p &= \mathbf{R}^{*T} \mathbf{L}^p \mathbf{R}^* = \hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1}, \\ \mathbf{L}_{(M)}^p &= \mathbf{F}^{*-1} \mathbf{L}^p \mathbf{F}^* = \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{L}_{(m)}^p \hat{\mathbf{U}}^e = \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \end{aligned} \right\} \dots (2.44)$$

ただし,  $\mathbf{L}_{(M)}^e$  は本理論展開では不要なため, その配置変換は省略する.

また, 式 (2.40) を対称部分と反対称部分に Descartes 分解して次のように表す.

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_S + \mathbf{L}_A = \mathbf{D} + \mathbf{W} \dots\dots\dots (2.45)$$

ここで,  $(\bullet)_S$  は任意のテンソル量  $(\bullet)$  の対称部分を表す. また,  $\mathbf{D}$  および  $\mathbf{W}$  はそれぞれ変形速度および連続体スピンであり, 次のように表される.

$$\mathbf{D} \equiv \mathbf{L}_S = \mathbf{R}^* (\dot{\hat{\mathbf{U}}^e} \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_S \mathbf{R}^{*\top} + \mathbf{R}^* (\hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_S \mathbf{R}^{*\top} \dots\dots\dots (2.46)$$

$$\mathbf{W} \equiv \mathbf{L}_A = \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*\top} + \mathbf{R}^* (\hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_A \mathbf{R}^{*\top} \dots\dots\dots (2.47)$$

ただし, 式 (2.9) を考慮している. さらに, 式 (2.46) および式 (2.47) をそれぞれ次式のように弾塑性分解する.

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^e + \mathbf{D}^p \dots\dots\dots (2.48)$$

$$\mathbf{W} = \mathbf{W}^* + \mathbf{W}^p \dots\dots\dots (2.49)$$

ここで,  $\mathbf{D}^e$  および  $\mathbf{D}^p$  はそれぞれ弾性変形速度および塑性変形速度であり次式で表される.

$$\mathbf{D}^e = (\mathbf{L}^e)_S = \mathbf{R}^* (\dot{\hat{\mathbf{U}}^e} \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_S \mathbf{R}^{*\top} = \mathbf{R}^* \dot{\hat{\mathbf{U}}^e} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*\top} \dots\dots\dots (2.50)$$

$$\mathbf{D}^p = (\mathbf{L}^p)_S = \mathbf{R}^* (\hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_S \mathbf{R}^{*\top} \dots\dots\dots (2.51)$$

一方,  $\mathbf{W}^*$  および  $\mathbf{W}^p$  はそれぞれ次式で表される下部構造スピンおよび塑性スピンである.

$$\mathbf{W}^* = (\mathbf{L}^e)_A = \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*\top} \dots\dots\dots (2.52)$$

$$\mathbf{W}^p = (\mathbf{L}^p)_A = \mathbf{R}^* (\hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_A \mathbf{R}^{*\top} \dots\dots\dots (2.53)$$

### 2.3.2 変形速度の配置変換則

式 (2.39) および式 (2.45) より, 変形速度  $\mathbf{D}$  の配置変換則は次式で与えられる.

$$\mathbf{D} = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(m)} \mathbf{R}^{*\top} = \mathbf{F}^* \mathbf{D}_{(M)} \mathbf{F}^{*-1}, \quad \mathbf{D}_{(m)} = \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{D}_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \dots\dots\dots (2.54)$$

したがって, 弾性変形速度  $\mathbf{D}^e$  および塑性変形速度  $\mathbf{D}^p$  の配置変換則は次のようになる.

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{D}^e &= \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(m)}^e \mathbf{R}^{*\top} = \mathbf{F}^* \mathbf{D}_{(M)}^e \mathbf{F}^{*-1}, \\ \mathbf{D}^p &= \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(m)}^p \mathbf{R}^{*\top} = \mathbf{F}^* \mathbf{D}_{(M)}^p \mathbf{F}^{*-1} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (2.55)$$

また, 式 (2.43), 式 (2.50) および式 (2.55)<sub>1</sub> より, 第 2 中間配置  $\beta_{(m)}$  における弾性変形速度  $\mathbf{D}_{(m)}^e$  は次のように書ける.

$$\mathbf{D}_{(m)}^e = (\mathbf{L}_{(m)}^e)_S = (\dot{\hat{\mathbf{U}}^e} \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_S = \dot{\hat{\mathbf{U}}^e} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \dots\dots\dots (2.56)$$

ただし、最後の等式には式(2.9)を考慮している。

一方、式(2.44)、式(2.51)および式(2.55)<sub>2</sub>より第2中間配置 $\beta_{(m)}$ および第1中間配置 $\beta_{(M)}$ における塑性変形速度 $\mathbf{D}_{(m)}^p$ および $\mathbf{D}_{(M)}^p$ はそれぞれ次式のようになる。

$$\mathbf{D}_{(m)}^p = (\mathbf{L}_{(m)}^p)_S = (\hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_S \dots \dots \dots (2.57)$$

$$\mathbf{D}_{(M)}^p = (\mathbf{L}_{(M)}^p)_S = (\dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1})_S \dots \dots \dots (2.58)$$

### 2.3.3 スピンの配置変換則

前項と同様に、式(2.39)および式(2.45)より連続体スピン $\mathbf{W}$ 、下部構造スピン $\mathbf{W}^*$ および塑性スピン $\mathbf{W}^p$ の配置変換則はそれぞれ次式で与えられる。

$$\mathbf{W} = \mathbf{R}^* \mathbf{W}_{(m)} \mathbf{R}^{*\top} = \mathbf{F}^* \mathbf{W}_{(M)} \mathbf{F}^{*-1}, \quad \mathbf{W}_{(m)} = \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{W}_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \dots \dots \dots (2.59)$$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{W}^* &= \mathbf{R}^* \mathbf{W}_{(m)}^* \mathbf{R}^{*\top} = \mathbf{F}^* \mathbf{W}_{(M)}^* \mathbf{F}^{*-1}, \\ \mathbf{W}^p &= \mathbf{R}^* \mathbf{W}_{(m)}^p \mathbf{R}^{*\top} = \mathbf{F}^* \mathbf{W}_{(M)}^p \mathbf{F}^{*-1} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (2.60)$$

また、式(2.44)、式(2.53)および式(2.60)<sub>2</sub>より第1中間配置 $\beta_{(M)}$ における塑性スピン $\mathbf{W}_{(M)}^p$ は次式のようになる。

$$\mathbf{W}_{(M)}^p = (\mathbf{L}_{(M)}^p)_A = (\dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1})_A \dots \dots \dots (2.61)$$

## 2.4 ひずみ速度

### 2.4.1 弾性ひずみ速度

弾性ひずみの参照配置は第1中間配置 $\beta_{(M)}$ であり、式(2.34)より

$$\mathbf{E}_{(M)}^e = \hat{\mathbf{U}}^{e\top} \mathbf{E}_{(m)}^e \hat{\mathbf{U}}^e = \mathbf{F}^{*\top} \mathbf{E}^e \mathbf{F}^* \dots \dots \dots (2.62)$$

となる。式(2.62)の両辺の物質時間微分は

$$\dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e = (\hat{\mathbf{U}}^{e\top} \mathbf{E}_{(m)}^e \hat{\mathbf{U}}^e)^\bullet = (\mathbf{F}^{*\top} \mathbf{E}^e \mathbf{F}^*)^\bullet \dots \dots \dots (2.63)$$

であり、式(2.63)の最初の等式は次のように書ける。

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e &= (\hat{\mathbf{U}}^{e\top} \mathbf{E}_{(m)}^e \hat{\mathbf{U}}^e)^\bullet = \dot{\hat{\mathbf{U}}^{e\top}} \mathbf{E}_{(m)}^e \hat{\mathbf{U}}^e + \hat{\mathbf{U}}^{e\top} \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e \hat{\mathbf{U}}^e + \hat{\mathbf{U}}^{e\top} \mathbf{E}_{(m)}^e \dot{\hat{\mathbf{U}}^e} \\ &= \hat{\mathbf{U}}^{e\top} (\dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \hat{\mathbf{U}}^{e-\top} \dot{\hat{\mathbf{U}}^{e\top}} \mathbf{E}_{(m)}^e + \mathbf{E}_{(m)}^e \dot{\hat{\mathbf{U}}^e} \hat{\mathbf{U}}^{e-1}) \hat{\mathbf{U}}^e \\ &= \hat{\mathbf{U}}^{e\top} (\dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \mathbf{D}_{(m)}^e \mathbf{E}_{(m)}^e + \mathbf{E}_{(m)}^e \mathbf{D}_{(m)}^e) \hat{\mathbf{U}}^e \dots \dots \dots (2.64) \end{aligned}$$

ただし、式(2.56)の関係を用いている。また、式(2.63)の2番目の等式は次式のように書ける。

$$\dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e = (\mathbf{F}^{*\top} \mathbf{E}^e \mathbf{F}^*)^\bullet = \mathbf{F}^{*\top} (\dot{\mathbf{E}}^e + \mathbf{L}^{e\top} \mathbf{E}^e + \mathbf{E}^e \mathbf{L}^e) \mathbf{F}^* \dots \dots \dots (2.65)$$

ただし、式(2.41)を用いている。したがって、式(2.64)および式(2.65)より弾性ひずみ速度の配置変換則が次式のように得られる。

$$\hat{\mathbf{E}}^e = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{E}}_{(m)}^e \mathbf{R}^{*\top} = \mathbf{F}^{*-T} \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e \mathbf{F}^{*-1}, \quad \hat{\mathbf{E}}_{(m)}^e = \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \dots (2.66)$$

ただし、 $\hat{\mathbf{E}}_{(m)}^e$  および  $\hat{\mathbf{E}}^e$  はそれぞれ次式で定義する客観速度を表す。

$$\hat{\mathbf{E}}_{(m)}^e \equiv \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \mathbf{D}_{(m)}^e \mathbf{E}_{(m)}^e + \mathbf{E}_{(m)}^e \mathbf{D}_{(m)}^e \dots (2.67)$$

$$\hat{\mathbf{E}}^e \equiv \dot{\mathbf{E}}^e + \mathbf{L}^{eT} \mathbf{E}^e + \mathbf{E}^e \mathbf{L}^e \dots (2.68)$$

また、式(2.24)の物質時間微分をとれば  $\dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e$  が次式のように得られる。

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e &= \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{U}}^{eT} \hat{\mathbf{U}}^e - \mathbf{I})^\bullet = \frac{1}{2} (\dot{\hat{\mathbf{U}}}^{eT} \hat{\mathbf{U}}^e + \hat{\mathbf{U}}^{eT} \dot{\hat{\mathbf{U}}}^e) = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{U}}^{eT} (\dot{\hat{\mathbf{U}}}^{e-T} \hat{\mathbf{U}}^{eT} + \dot{\hat{\mathbf{U}}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1}) \hat{\mathbf{U}}^e \\ &= \frac{1}{2} \hat{\mathbf{U}}^{eT} [\dot{\hat{\mathbf{U}}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} + (\dot{\hat{\mathbf{U}}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1})^T] \hat{\mathbf{U}}^e = \hat{\mathbf{U}}^{eT} (\dot{\hat{\mathbf{U}}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_S \hat{\mathbf{U}}^e \dots (2.69) \end{aligned}$$

次に、式(2.34)<sub>1</sub>より第2中間配置  $\beta_{(m)}$  における弾性ひずみは

$$\mathbf{E}_{(m)}^e = \mathbf{R}^{*\top} \mathbf{E}^e \mathbf{R}^* \dots (2.70)$$

となるため、その物質時間微分は式(2.17)より

$$\dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e = \mathbf{R}^{*\top} \overset{\nabla}{\mathbf{E}}^e \mathbf{R}^* \dots (2.71)$$

と書ける。ただし、式(2.71)の右辺は弾性ひずみ  $\mathbf{E}^e$  の式(2.19)にて定義した Mandel-Kratovichil 速度

$$\overset{\nabla}{\mathbf{E}}^e = \dot{\mathbf{E}}^e - \mathbf{W}^* \mathbf{E}^e + \mathbf{E}^e \mathbf{W}^* \dots (2.72)$$

である。式(2.71)の両辺に左側から  $\mathbf{R}^*$ 、右側から  $\mathbf{R}^{*\top}$  をそれぞれ乗じると次の配置変換則が得られる。

$$\overset{\nabla}{\mathbf{E}}^e = \mathbf{R}^* \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e \mathbf{R}^{*\top} \dots (2.73)$$

## 2.4.2 塑性ひずみ速度

塑性ひずみの参照配置は初期配置  $\beta_{(I)}$  であり、式(2.35)より

$$\mathbf{E}_{(I)}^p = \mathbf{F}^{pT} \mathbf{E}_{(M)}^p \mathbf{F}^p = \overline{\mathbf{F}}^T \mathbf{E}_{(m)}^p \overline{\mathbf{F}} = \mathbf{F}^T \mathbf{E}^p \mathbf{F} \dots (2.74)$$

と書ける。式(2.74)の物質時間微分をとれば次のようになる。

$$\dot{\mathbf{E}}_{(I)}^p = (\mathbf{F}^{pT} \mathbf{E}_{(M)}^p \mathbf{F}^p)^\bullet = (\overline{\mathbf{F}}^T \mathbf{E}_{(m)}^p \overline{\mathbf{F}})^\bullet = (\mathbf{F}^T \mathbf{E}^p \mathbf{F})^\bullet \dots (2.75)$$

ここで、式(2.75)の最初の等式は

$$\dot{\mathbf{E}}_{(I)}^p = (\mathbf{F}^{pT} \mathbf{E}_{(M)}^p \mathbf{F}^p)^\bullet = \dot{\mathbf{F}}^{pT} \mathbf{E}_{(M)}^p \mathbf{F}^p + \mathbf{F}^{pT} \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^p \mathbf{F}^p + \mathbf{F}^{pT} \mathbf{E}_{(M)}^p \dot{\mathbf{F}}^p$$

$$= \mathbf{F}^{\text{pT}} \left( \dot{\mathbf{E}}_{(\text{M})}^{\text{p}} + \mathbf{L}_{(\text{M})}^{\text{pT}} \mathbf{E}_{(\text{M})}^{\text{p}} + \mathbf{E}_{(\text{M})}^{\text{p}} \mathbf{L}_{(\text{M})}^{\text{p}} \right) \mathbf{F}^{\text{p}} \dots \dots \dots (2.76)$$

と書ける. 同様に (2.75) の 2 番目, 3 番目の等式はそれぞれ次のように書ける.

$$\dot{\mathbf{E}}_{(\text{I})}^{\text{p}} = \overline{\mathbf{F}}^{\text{T}} \left( \dot{\mathbf{E}}_{(\text{m})}^{\text{p}} + \mathbf{L}_{(\text{m})}^{\text{T}} \mathbf{E}_{(\text{m})}^{\text{p}} + \mathbf{E}_{(\text{m})}^{\text{p}} \mathbf{L}_{(\text{m})} \right) \overline{\mathbf{F}} \dots \dots \dots (2.77)$$

$$\dot{\mathbf{E}}_{(\text{I})}^{\text{p}} = \mathbf{F}^{\text{T}} \left( \dot{\mathbf{E}}^{\text{p}} + \mathbf{L}^{\text{T}} \mathbf{E}^{\text{p}} + \mathbf{E}^{\text{p}} \mathbf{L} \right) \mathbf{F} \dots \dots \dots (2.78)$$

したがって, 式 (2.76)~式 (2.78) より塑性ひずみ速度の配置変換則が次式のように得られる.

$$\hat{\mathbf{E}}^{\text{p}} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{E}}_{(\text{m})}^{\text{p}} \mathbf{R}^{*\text{T}} = \mathbf{F}^{*\text{-T}} \hat{\mathbf{E}}_{(\text{M})}^{\text{p}} \mathbf{F}^{*-1} = \mathbf{F}^{\text{-T}} \dot{\mathbf{E}}_{(\text{I})}^{\text{p}} \mathbf{F}^{-1} \dots \dots \dots (2.79)$$

ただし,  $\hat{\mathbf{E}}_{(\text{M})}^{\text{p}}$ ,  $\hat{\mathbf{E}}_{(\text{m})}^{\text{p}}$  および  $\hat{\mathbf{E}}^{\text{p}}$  はそれぞれ次式で定義する客観速度である.

$$\hat{\mathbf{E}}_{(\text{M})}^{\text{p}} \equiv \dot{\mathbf{E}}_{(\text{M})}^{\text{p}} + \mathbf{L}_{(\text{M})}^{\text{pT}} \mathbf{E}_{(\text{M})}^{\text{p}} + \mathbf{E}_{(\text{M})}^{\text{p}} \mathbf{L}_{(\text{M})}^{\text{p}} \dots \dots \dots (2.80)$$

$$\hat{\mathbf{E}}_{(\text{m})}^{\text{p}} \equiv \dot{\mathbf{E}}_{(\text{m})}^{\text{p}} + \mathbf{L}_{(\text{m})}^{\text{T}} \mathbf{E}_{(\text{m})}^{\text{p}} + \mathbf{E}_{(\text{m})}^{\text{p}} \mathbf{L}_{(\text{m})} \dots \dots \dots (2.81)$$

$$\hat{\mathbf{E}}^{\text{p}} \equiv \dot{\mathbf{E}}^{\text{p}} + \mathbf{L}^{\text{T}} \mathbf{E}^{\text{p}} + \mathbf{E}^{\text{p}} \mathbf{L} \dots \dots \dots (2.82)$$

なお, 式 (2.82) で示した任意の 2 階のテンソル  $\underline{\mathbf{A}}$  に対する

$$\hat{\underline{\mathbf{A}}} \equiv \underline{\dot{\mathbf{A}}} + \mathbf{L}^{\text{T}} \underline{\mathbf{A}} + \underline{\mathbf{A}} \mathbf{L} \dots \dots \dots (2.83)$$

形の速度は Cotter-Rivlin 速度または lower-convected 導関数<sup>(80)</sup> と呼ばれる客観速度である. また, 式 (2.25) の物質時間微分をとれば  $\dot{\mathbf{E}}_{(\text{I})}^{\text{p}}$  が次のように得られる.

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{E}}_{(\text{I})}^{\text{p}} &= \frac{1}{2} \left( \mathbf{F}^{\text{pT}} \dot{\mathbf{F}}^{\text{p}} - \dot{\mathbf{I}} \right) = \frac{1}{2} \left( \dot{\mathbf{F}}^{\text{pT}} \mathbf{F}^{\text{p}} + \mathbf{F}^{\text{pT}} \dot{\mathbf{F}}^{\text{p}} \right) = \frac{1}{2} \mathbf{F}^{\text{pT}} \left( \mathbf{F}^{\text{p-T}} \dot{\mathbf{F}}^{\text{pT}} + \dot{\mathbf{F}}^{\text{p}} \mathbf{F}^{\text{p-1}} \right) \mathbf{F}^{\text{p}} \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{F}^{\text{pT}} \left[ \dot{\mathbf{F}}^{\text{p}} \mathbf{F}^{\text{p-1}} + \left( \dot{\mathbf{F}}^{\text{p}} \mathbf{F}^{\text{p-1}} \right)^{\text{T}} \right] \mathbf{F}^{\text{p}} = \mathbf{F}^{\text{pT}} \left( \dot{\mathbf{F}}^{\text{p}} \mathbf{F}^{\text{p-1}} \right)_{\text{S}} \mathbf{F}^{\text{p}} \dots \dots \dots (2.84) \end{aligned}$$

## 2.5 ひずみ速度と変形速度

本節では, 前節までに示したひずみ速度と変形速度の関係性を述べる. その際, 金属材料の変形に一般的な微小弾性変形の仮定を導入する.

### 2.5.1 金属材料における微小弾性変形の仮定

本研究の対象である金属材料は, 一般に弾性変形は微小なものとなる. したがって, 配置変換則中に現れる弾性ストレッチ  $\hat{\mathbf{U}}^{\text{e}}$  は塑性変形こう配  $\mathbf{F}^{\text{p}}$  や剛体・弾性回転  $\mathbf{R}^*$  と比較した場合に十分小さいものとして  $\hat{\mathbf{U}}^{\text{e}} \approx \mathbf{I}$  とみなすことができる. この微小弾性変形の仮定を導入すると, 式 (2.34) および式 (2.35) において次式のような近似が成り立つ.

$$\mathbf{E}_{(\text{m})}^{\text{e}} = \hat{\mathbf{U}}^{\text{e-T}} \mathbf{E}_{(\text{M})}^{\text{e}} \hat{\mathbf{U}}^{\text{e-1}} \approx \mathbf{E}_{(\text{M})}^{\text{e}}, \quad \mathbf{E}_{(\text{m})}^{\text{p}} = \hat{\mathbf{U}}^{\text{e-T}} \mathbf{E}_{(\text{M})}^{\text{p}} \hat{\mathbf{U}}^{\text{e-1}} \approx \mathbf{E}_{(\text{M})}^{\text{p}} \dots \dots \dots (2.85)$$

したがって、これらの物質時間微分は次のように近似できる。

$$\dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e \approx \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e, \quad \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^p \approx \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^p \dots \dots \dots (2.86)$$

また、式(2.55)に微小弾性変形の仮定を用いると

$$\mathbf{D}_{(m)}^e = \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{D}_{(M)}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \approx \mathbf{D}_{(M)}^e, \quad \mathbf{D}_{(m)}^p = \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{D}_{(M)}^p \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \approx \mathbf{D}_{(M)}^p \dots \dots \dots (2.87)$$

となる。さらに、微小弾性変形の仮定では弾性変形にともなう体積変化も微小と考えるため、式(2.13)は

$$J = J^e \approx 1 \dots \dots \dots (2.88)$$

と書ける。なお、以上の仮定においても非弾性的な変形および回転、すなわち塑性変形および剛体回転は有限と考える。

### 2.5.2 ひずみ速度と変形速度の関係

式(2.56)および式(2.69)を比較すると、弾性変形速度と弾性ひずみ速度に次の関係があることがわかる。

$$\mathbf{D}_{(m)}^e = \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \approx \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e \approx \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e \dots \dots \dots (2.89)$$

ただし、近似記号には微小弾性変形の仮定を用いている。したがって、式(2.55)<sub>1</sub>より弾性変形速度と弾性ひずみ速度の関係は次のように表せる。

$$\mathbf{D}^e = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(m)}^e \mathbf{R}^{*T} \approx \mathbf{R}^* \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (2.90)$$

一方、式(2.58)および式(2.84)を比較すれば、塑性変形速度と塑性ひずみ速度に次の関係があることがわかる。

$$\mathbf{D}_{(M)}^p = \mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{E}}_{(I)}^p \mathbf{F}^{p-1} \dots \dots \dots (2.91)$$

したがって、式(2.55)<sub>2</sub>、式(2.87)<sub>2</sub>および式(2.91)より、塑性変形速度と塑性ひずみ速度の関係は次のように記述できる。

$$\mathbf{D}^p = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(m)}^p \mathbf{R}^{*T} \approx \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(M)}^p \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* \mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{E}}_{(I)}^p \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (2.92)$$

また、式(2.79)に微小弾性変形の仮定を適用すれば

$$\hat{\mathbf{E}}^p = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{E}}_{(m)}^p \mathbf{R}^{*T} \approx \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{E}}_{(M)}^p \mathbf{R}^{*T} \approx \mathbf{R}^* \mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{E}}_{(I)}^p \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (2.93)$$

を得る。したがって、式(2.73)と式(2.90)および式(2.92)と式(2.93)を比較すれば、現配置 $\beta_{(c)}$ および第2中間配置 $\beta_{(m)}$ におけるひずみ速度と変形速度の各成分に対する関係が次式のように得られる。

$$\mathbf{D}^e \approx \overset{\vee}{\mathbf{E}}^e, \quad \mathbf{D}_{(m)}^e \approx \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e \dots \dots \dots (2.94)$$

$$\mathbf{D}^p \approx \hat{\mathbf{E}}^p, \quad \mathbf{D}_{(m)}^p \approx \hat{\mathbf{E}}_{(m)}^p \dots \dots \dots (2.95)$$

### 2.5.3 ひずみ尺度と変形尺度

式(2.94)および式(2.95)より, 第2中間配置 $\beta_{(m)}$ における変形速度の弾塑性分解は次のように記述できる.

$$\mathbf{D}_{(m)} = \mathbf{D}_{(m)}^e + \mathbf{D}_{(m)}^p = \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^p \dots \dots \dots (2.96)$$

また, 式(2.96)を時間積分すると次式を得る.

$$\left. \begin{aligned} \int \mathbf{D}_{(m)} dt &= \int \mathbf{D}_{(m)}^e dt + \int \mathbf{D}_{(m)}^p dt = \mathbf{E}_{(m)}^e + \bar{\mathbf{E}}_{(m)}^p \\ \text{or} \\ \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \dot{\bar{\mathbf{E}}}_{(m)}^p &= \mathbf{D}_{(m)}^e + \mathbf{D}_{(m)}^p \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (2.97)$$

すなわち, 式(2.97)より次式が成り立つ.

$$\bar{\mathbf{E}}_{(m)}^p \equiv \int \mathbf{D}_{(m)}^p dt = \int \dot{\bar{\mathbf{E}}}_{(m)}^p dt \neq \mathbf{E}_{(m)}^p \dots \dots \dots (2.98)$$

したがって, 式(2.98)における塑性ひずみ $\bar{\mathbf{E}}_{(m)}^p$ は熱力学的状態変数となり得ない, 経路依存の回復不可能な塑性変形尺度と定義できる. それに対して, 弾性ひずみ $\mathbf{E}_{(m)}^e$ は熱力学的状態変数となる, 経路非依存の回復可能な弾性ひずみ尺度と定義できる. ここで, Shizawa<sup>(82)</sup>の見解によると構成式の共回転速度に用いるスピンには熱力学的要求が与えられる. その要求とは, 「共回転速度に用いるスピンは弾性ひずみが熱力学的状態変数として定義されるように選定された中間配置と関連せねばならない」というものである. したがって, 現配置 $\beta_{(c)}$ から剛体・弾性回転を取り除いた第2中間配置 $\beta_{(m)}$ および第2中間配置に関連する下部構造スピン $\mathbf{W}^*$ はこの要求を満たすため, 後述する構成式の参照配置として第2中間配置を選定するのが妥当といえる.

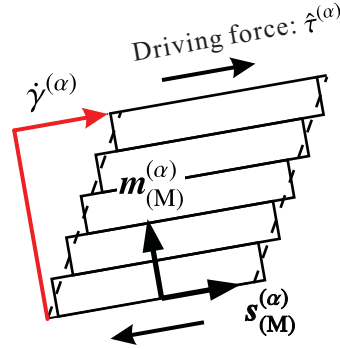
## 2.6 結晶塑性論における塑性変形の記述

本節では, 結晶塑性論<sup>(51)</sup>における塑性速度こう配の定義を示し, そのDescartes分解を行うことで塑性変形速度および塑性スピンの具体形を述べる.

### 2.6.1 塑性速度こう配の定義

2.1節で述べたように, 図2.3に示すような金属結晶の $\alpha$ 活動すべり系に対して第1中間配置 $\beta_{(M)}$ におけるすべり方向の結晶基底を $\mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)}$ , すべり面法線方向の結晶基底を $\mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)}$ とする. ただし,  $\mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)}$ および $\mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)}$ はともに単位ベクトルである. 結晶塑性論では, 式(2.44)<sub>2</sub>に示した第1中間配置における塑性速度こう配 $\mathbf{L}_{(M)}^p$ は次式のように定義される<sup>(51)(83)</sup>.

$$\mathbf{L}_{(M)}^p = \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \equiv \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.99)$$

Fig. 2.3 Plastic deformation due to crystallographic slip on  $\alpha$  activated slip system.

ここで、 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  は  $\alpha$  すべり系のすべり速度（塑性せん断ひずみ速度）である。また、式 (2.44) および式 (2.99) より結晶基底  $s^{(\alpha)}$ 、 $m^{(\alpha)}$  の Dyad に対する配置変換則が次式のように得られる。

$$\begin{aligned} s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} &= \mathbf{R}^* (s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes m_{(m)}^{(\alpha)}) \mathbf{R}^{*\text{T}} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e (s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)}) \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*\text{T}} \\ &\approx \mathbf{R}^* (s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)}) \mathbf{R}^{*\text{T}} \dots \dots \dots (2.100) \end{aligned}$$

ただし、式 (2.100) における近似記号には微小弾性変形の仮定を用いている。したがって、式 (2.44) を考慮すると各配置における塑性速度こう配がそれぞれ次のように書ける。

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{L}^p &= \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}, \\ \mathbf{L}_{(m)}^p &= \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes m_{(m)}^{(\alpha)} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (2.101)$$

また、式 (2.100) より結晶基底  $s^{(\alpha)}$  および  $m^{(\alpha)}$  に対する個別の配置変換則を次のように記述できる。

$$s^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* s_{(m)}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e s_{(M)}^{(\alpha)} = \mathbf{F}^* s_{(M)}^{(\alpha)} = \mathbf{F}^* s_{(l)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.102)$$

$$m^{(\alpha)} = m_{(m)}^{(\alpha)} \mathbf{R}^{*\text{T}} = m_{(M)}^{(\alpha)} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*\text{T}} = m_{(M)}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{*-1} = m_{(l)}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{*-1} \dots \dots \dots (2.103)$$

すなわち、 $s^{(\alpha)}$  は反変的な、 $m^{(\alpha)}$  は共変的な配置変換則<sup>(79)(81)</sup>に従う。なお、任意のベクトル  $\underline{a}$  と 2 階のテンソル  $\underline{A}$  の線形変換が  $\underline{a}_j A_{ji}$  と指標表記される場合、Rational 記法の直接表示では通常  $\underline{A}^{\text{T}} \underline{a}$  と記される。しかしながら、 $\underline{A}$  が第 1 中間配置  $\beta_{(M)}$  のような非ホロミック配置を参照とする 2 点テンソルの場合  $\underline{A}^{\text{T}} \underline{a} \neq \underline{a} \underline{A}$  であるため<sup>(81)</sup>、式 (2.103) では便宜上  $\underline{a} \underline{A}$  のように表示している。また、式 (2.15) に示すように結晶基底は  $\mathbf{F}^p$  による変換を受けないことに注意されたい。

## 2.6.2 塑性変形速度と塑性スピン

式 (2.99) で示した第 1 中間配置  $\beta_{(M)}$  における塑性速度こう配  $\mathbf{L}_{(M)}^p$  を対称部分と反対称部分に Descartes 分解すれば

$$\mathbf{L}_{(M)}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(M)S}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(M)A}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.104)$$



と書ける. ここで,  $\mathbf{P}_{(M)}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)}$  であり,  $\mathbf{P}_{(M)S}^{(\alpha)}$  および  $\mathbf{P}_{(M)A}^{(\alpha)}$  はそれぞれ

$$\mathbf{P}_{(M)S}^{(\alpha)} = \left( \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right)_S = \frac{1}{2} \left( \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (2.105)$$

$$\mathbf{P}_{(M)A}^{(\alpha)} = \left( \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right)_A = \frac{1}{2} \left( \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} - \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (2.106)$$

と表される  $\mathbf{P}_{(M)}^{(\alpha)}$  の対称部分および反対称部分である. なお,  $\mathbf{P}_{(M)S}^{(\alpha)}$  は Schmid テンソルと呼ばれる. 式(2.58)および式(2.61)より, 第1中間配置における塑性変形速度  $\mathbf{D}_{(M)}^p$  および塑性スピン  $\mathbf{W}_{(M)}^p$  はそれぞれ  $\mathbf{L}_{(M)}^p$  の対称部分および反対称部分として定義されるため, 式(2.104)より次式のように表される.

$$\mathbf{D}_{(M)}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(M)S}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.107)$$

$$\mathbf{W}_{(M)}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(M)A}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.108)$$

また,  $\mathbf{L}_{(M)}^p$ ,  $\mathbf{D}_{(M)}^p$  および  $\mathbf{W}_{(M)}^p$  の配置変換則は式(2.100)に従うため,

$$\mathbf{D}^p = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(M)}^p \mathbf{R}^{*\top} \approx \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(M)}^p \mathbf{R}^{*\top} \dots \dots \dots (2.109)$$

$$\mathbf{W}^p = \mathbf{R}^* \mathbf{W}_{(M)}^p \mathbf{R}^{*\top} \approx \mathbf{R}^* \mathbf{W}_{(M)}^p \mathbf{R}^{*\top} \dots \dots \dots (2.110)$$

となる. なお, 式(2.109)および式(2.110)はそれぞれ式(2.55)<sub>2</sub> および式(2.60)<sub>2</sub> に微小弾性変形の仮定を適用したものに等しい. 式(2.109)および式(2.110)より, 各配置における塑性変形速度および塑性スピンは

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{D}^p &= \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_S^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \left( \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} \right)_S, \\ \mathbf{D}_{(m)}^p &= \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \left( \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} \right)_S \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (2.111)$$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{W}^p &= \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_A^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \left( \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} \right)_A, \\ \mathbf{W}_{(m)}^p &= \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)A}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \left( \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} \right)_A \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (2.112)$$

と表される.

## 2.7 転位密度の表現

金属の塑性変形の記述において転位の数理モデリングは極めて重要である. 本節では, 転位密度の表現方法およびその定式化について述べる.

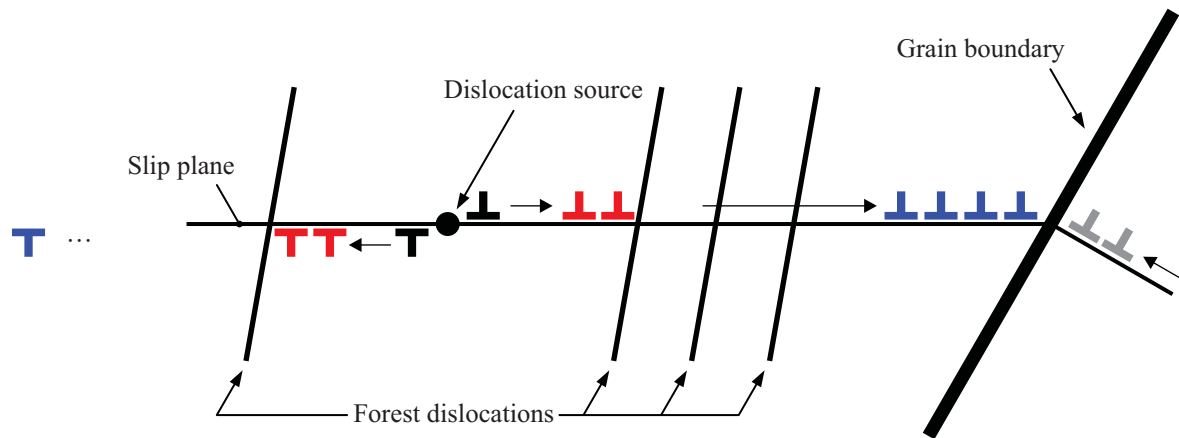


Fig. 2.4 Classification of dislocations.

### 2.7.1 2種類の転位密度

一般に転位は、短範囲応力場および長範囲応力場を形成する2種類の結晶欠陥に大別することができる<sup>(84)</sup>。図2.4は転位源から発生した転位が障害物により運動を阻害されて蓄積する様子を表したものである。同図において赤色で示す転位は、林立転位のような潜在的な障害物にトラップされて短距離運動した後に蓄積した転位を表しており、対をなす異符号の転位が近くに存在する。したがって、このような転位対では個々の転位が作用する応力場が打消し合うため短範囲応力場を形成する。一方、同図に青色で示す転位は林立転位等に捉えられず結晶粒界に突き当たるまで長距離運動した後に蓄積した転位を表し、対をなす異符号の転位は遥か遠方に存在する。したがって、これらの転位の間働く応力場は長範囲応力場に相当する。また、このような転位はBurgers回路と呼ばれる任意の回路を材料内に図2.5に示すように取った場合には孤立転位と考えることができる。図2.5に示すBurgers回路において、一般に転位対の密度 $\rho_S$ は「統計的に蓄積される転位(SS転位: statistically stored dislocation)密度」、孤立転位の密度 $\rho_G$ は「幾何学的に必要な転位(GN転位: geometrically necessary dislocation)密度」として表現される<sup>(84)</sup>。ここで、SS転位密度は可動転位の不動化、転位の上昇運動、転位の対消滅等の反応といった転位のダイナミクスの表現に適しており、すべり速度 $\dot{\gamma}^{(a)}$ に関連したスカラー発展式として定式化される<sup>(52)</sup>。また、SS転位密度を用いる場合には可動転位密度と不動転位密度の分類が可能となる。一方、GN転位密度はAshby<sup>(84)</sup>によりすべり $\dot{\gamma}^{(a)}$ の空間こう配に基づいて定義された量であり、これにより蓄積転位の幾何学的描像を捉えることができる。すなわち、蓄積した転位密度を刃状成分とらせん成分に分類でき、さらに転位の正負の符号の表現が可能となる。また、GN転位密度はすべりのこう配という幾何学量であることから寸法効果の表現に適している。しかしながら、GN転位密度は孤立転位密度に対応することから、Burgers回路内の転位対密度を表現することができない。その一方で、SS転位密度では結晶粒界などのすべりこう配が発生する領域に堆積する孤立転位群を表すことができない。

ここで、GN転位密度とSS転位密度は分解能の違いによって互いに入れ替わる量であることに注意されたい。図2.6はいくつかの転位を含んだ領域を囲む黒、青、赤の3種類のBurgers回路を表し

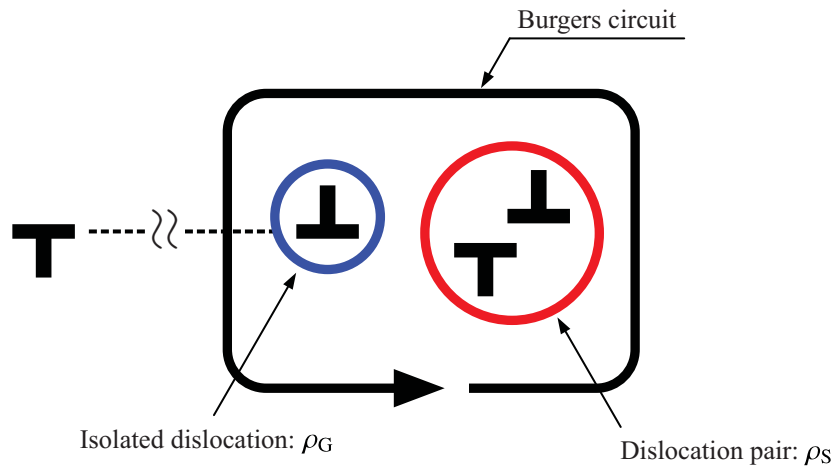


Fig. 2.5 Expression of dislocation in Burgers circuit.

ており，黒の Burgers 回路を考える場合には領域内に正の GN 転位が 1 つ（左側の孤立転位）および SS 転位が 1 つ（右側の転位対）が含まれることになる．しかしながら，それぞれの転位を内部に 1 つずつ含むような青の Burgers 回路を考えた場合には，この領域内の転位は全て GN 転位（2 つの正の GN 転位および 1 つの負の GN 転位）として計上される．すなわち，転位対を大局的に捉えるか，あるいは個々の異符号の孤立転位として局所的に捉えるかは任意性があり，前者は SS 転位，後者は GN 転位として考えることに相当する．すなわち，図 2.7(a) のように赤の Burgers 回路を考える場合には回路内に 1 つの転位対が存在し，その密度は SS 転位密度を用いて計算される．なお，この回路内では GN 転位密度は零となる．一方，同図 (b) のように青で表す 2 つの Burgers 回路を考える場合には個々の転位はそれぞれの回路において孤立転位となるため，それらの密度は各回路において正あるいは負の符号を有する GN 転位密度により計算される．すなわち，この場合には SS 転位密度は零となる．したがって，材料内に存在する転位は Burgers 回路のとり方次第で GN 転位とも SS 転位ともとらえることができる．ただし，図 2.7(b) のように回路内に転位対が含

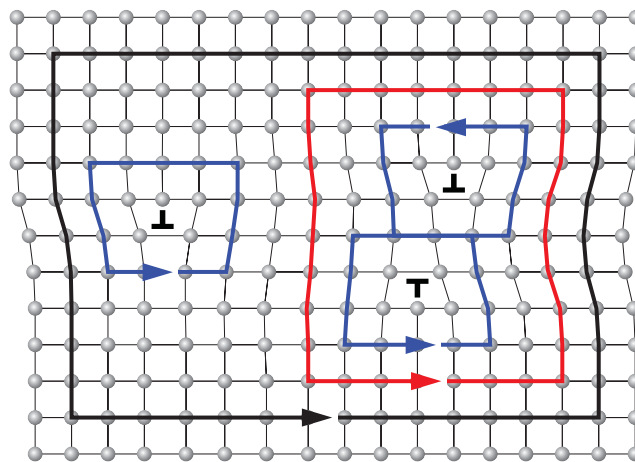


Fig. 2.6 Difference of representation of dislocation density in accordance with the way of taking Burgers circuits.

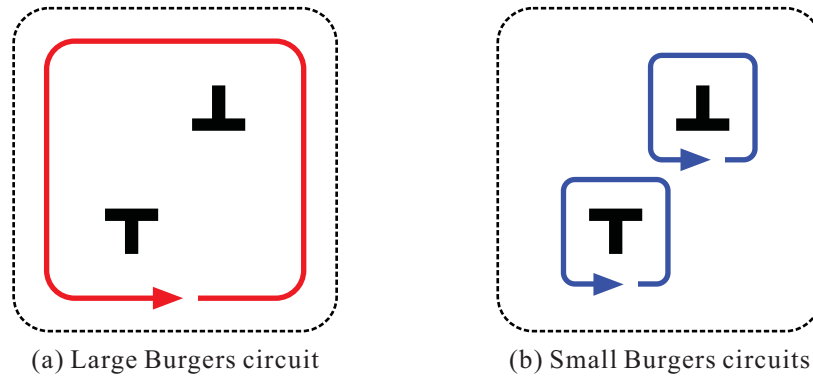


Fig. 2.7 Difference of expression of dislocation pair dependent on Burgers circuit.

まれないほど十分小さく Burgers 回路をとった場合には、全ての転位は GN 転位として表現可能なことがわかる。しかしながら、それほど小さな回路をとり全転位を孤立転位として考えることは、転位を群として取り扱う連続転位分布論<sup>(85)(86)</sup>の観点から望ましくない。なぜならば、前述のように孤立転位は長範囲応力場を形成するため、全ての転位を孤立転位と考えた際には個々の転位間に働く引力や斥力および転位運動の慣性力などを微視的な観点からより正確に記述せねばならないためである。また、本研究のように有限要素法に基づいて転位密度を計算する場合、Burgers 回路は一有限要素（メッシュ）に対応する。すなわち、非常に小さな Burgers 回路を考えることは極めて細かなメッシュ分割を行うことと同義である。このことは数値計算のコストの面から非現実的であり、実際にはある程度の大きさをもった Burgers 回路をとることが望ましい。その場合には、前述のように GN 転位のみでは全転位密度の表現に不十分であり SS 転位を考慮する必要がある。そこで本研究では、GN 転位と SS 転位の両方を考慮し、孤立転位密度を GN 転位密度で、転位対密度を SS 転位密度を用いてそれぞれ表現する。

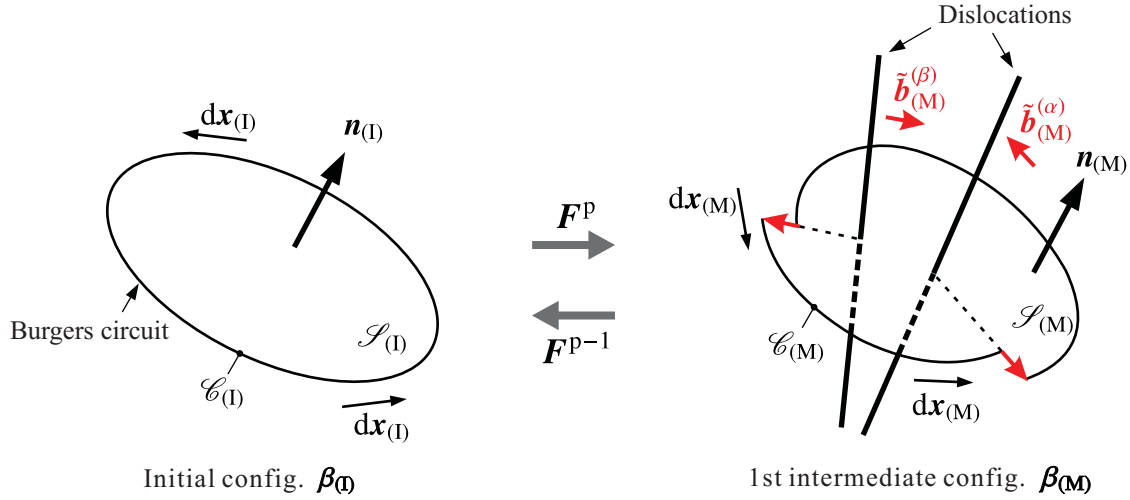
### 2.7.2 GN 転位密度と GN 転位ドリフト速度

第 1 中間配置  $\beta_{(M)}$  において、任意の Burgers 回路における正味の Burgers ベクトル  $\tilde{\mathbf{b}}_{(M)}^{(\alpha)}$  は図 2.8 に示すように第 1 中間配置において Burgers 回路に沿った微小線素の周回積分を行うことで次式のように表される<sup>(53)</sup>。

$$\tilde{\mathbf{b}}_{(M)} = \sum_{\alpha} \tilde{\mathbf{b}}_{(M)}^{(\alpha)} = - \oint_{\mathcal{C}_{(M)}} d\mathbf{x}_{(M)} \dots \dots \dots (2.113)$$

ここで、 $\mathcal{C}_{(M)}$  は第 1 中間配置における面積  $\mathcal{S}_{(M)}$  を囲う回路を表す。なお、式 (2.113) における Burgers ベクトルの符号の定義には任意性があり<sup>(87)</sup>、本研究では Kröner<sup>(88)</sup>の定義を用いている。しかしながら、この符号の定義は 7 章以降の数値解析結果には一切の影響を及ぼさないことを述べておく。式 (2.113) に式 (2.22) を代入し、Stokes の回転定理を適用すれば

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{b}}_{(M)} &= - \oint_{\mathcal{C}_{(M)}} \mathbf{F}^p d\mathbf{x}_{(M)} = - \oint_{\mathcal{C}_{(M)}} (\text{Curl } \mathbf{F}^p) \mathbf{n}_{(M)} da_{(M)} \\ &= - \oint_{\mathcal{S}_{(M)}} J^{p-1} (\text{Curl } \mathbf{F}^p) \mathbf{F}^{pT} \mathbf{n}_{(M)} da_{(M)} \dots \dots \dots (2.114) \end{aligned}$$

Fig. 2.8 Definition of Burgers vector<sup>(87)</sup>.

を得る. ここで,  $\mathbf{n}_{(I)}$  および  $d\mathbf{a}_{(I)}$  はそれぞれ初期配置  $\beta_{(I)}$  における物質表面  $\mathcal{S}_{(I)}$  上の外向き単位法線ベクトルおよび微小面積要素であり,  $\mathbf{n}_{(M)}$  および  $d\mathbf{a}_{(M)}$  はそれらの第1中間配置における量である. また, 式(2.114)の最後の等式では微小面積要素の第1中間配置への配置変換則<sup>(89)</sup>  $\mathbf{n}_{(M)}d\mathbf{a}_{(M)} = J^P \mathbf{F}^{P-T} \mathbf{n}_{(I)}d\mathbf{a}_{(I)}$  を用いている. ただし, 本研究では式(2.14)<sub>3</sub>に示すように  $J^P = 1$  となる. また, 一般に正味の Burgers ベクトルは微小面積要素の GN 転位テンソル  $\alpha_{(M)}$  による線形変換として次のように表される<sup>(53)(90)</sup>.

$$\tilde{\mathbf{b}}_{(M)} = \oint_{\mathcal{C}_{(M)}} \alpha_{(M)} \mathbf{n}_{(M)} d\mathbf{a}_{(M)} \dots \dots \dots (2.115)$$

したがって, 式(2.114)および式(2.115)を比較すれば, GN 転位テンソルが次式のように導かれる [補足 A.3 参照].

$$\alpha_{(M)} = -(\text{Curl} \mathbf{F}^P) \mathbf{F}^{P-T} \dots \dots \dots (2.116)$$

なお, 式(2.116)では  $J^{P-1}(=1)$  を省略している. また, GN 転位テンソルの配置変換則は次式で与えられる<sup>(75)</sup>.

$$\alpha = \mathbf{R}^* \alpha_{(m)} \mathbf{R}^{*T} = J^{e-1} \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \alpha_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{eT} \mathbf{R}^{*T} = J^{e-1} \mathbf{F}^* \alpha_{(M)} \mathbf{F}^{*T} \dots \dots \dots (2.117)$$

したがって, 各配置における GN 転位テンソルはそれぞれ次のように定義される [補足 A.4 参照].

$$\left. \begin{aligned} \alpha &\equiv -J^{e-1} \mathbf{F}^* (\text{Curl} \mathbf{F}^P) \mathbf{F}^{P-T} \mathbf{F}^{*T} \\ \alpha_{(m)} &\equiv -J^{e-1} \hat{\mathbf{U}}^e (\text{Curl} \mathbf{F}^P) \mathbf{F}^{P-T} \hat{\mathbf{U}}^{eT} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (2.118)$$

また, 微小弾性変形の仮定を用いると式(2.117)および式(2.118)<sub>2</sub>は次のように近似できる.

$$\alpha = \mathbf{R}^* \alpha_{(m)} \mathbf{R}^{*T} \approx \mathbf{R}^* \alpha_{(M)} \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (2.119)$$

$$\alpha_{(m)} \approx \alpha_{(M)} = -(\text{Curl} \mathbf{F}^P) \mathbf{F}^{P-T} \dots \dots \dots (2.120)$$

次に、式(2.116)で導出したGN転位テンソルをすべり系ごとの量 $(\bullet)^{(\alpha)}$ に分解することを考える。微小変形理論(全変形が微小)の場合には塑性変形こう配を $\mathbf{F}^p \approx \mathbf{I} + \sum_{\alpha} \gamma^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}$ と書くことができるため、式(2.120)最右辺は $\gamma^{(\alpha)}$ の2次の項を無視して $\boldsymbol{\alpha} \approx -\sum_{\alpha} \text{curl}(\gamma^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)})$ と書ける。ただし、 $\gamma^{(\alpha)} \equiv \int \dot{\gamma}^{(\alpha)} dt$ である。したがって、微小変形理論では $\boldsymbol{\alpha} = \sum_{\alpha} \boldsymbol{\alpha}^{(\alpha)}$ のようにGN転位テンソルをすべり系ごとの量に分解することができる<sup>(72)(91)(92)</sup>。しかしながら、本研究では塑性変形は有限と考えるため上述のような $\mathbf{F}^p$ の結晶塑性論的表現は行えず、 $\boldsymbol{\alpha}_{(M)}$ を単純に $\boldsymbol{\alpha}_{(M)} = \sum_{\alpha} \boldsymbol{\alpha}_{(M)}^{(\alpha)}$ のように分解できない。そこで、この問題を解決するためにGurtin<sup>(91)</sup>は以下に示すような $\boldsymbol{\alpha}_{(M)}$ の客観速度を導入している。まず、式(2.116)の物質時間微分をとり、式(2.116)および式(2.99)を考慮すれば

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)} &= -\left[ (\text{Curl } \mathbf{F}^p) \mathbf{F}^{pT} \right]^{\bullet} = -(\text{Curl } \dot{\mathbf{F}}^p) \mathbf{F}^{pT} - (\text{Curl } \mathbf{F}^p) \dot{\mathbf{F}}^{pT} \\ &= \mathbf{L}_{(M)}^p \boldsymbol{\alpha}_{(M)} + \boldsymbol{\alpha}_{(M)} \mathbf{L}_{(M)}^{pT} - \text{curl}_{(M)} \mathbf{L}_{(M)}^p \dots \dots \dots (2.121) \end{aligned}$$

と書ける[補足A.5参照]。ここで、 $\text{curl}_{(M)}(\bullet)$ は微分演算子ナブラの配置変換則 $\nabla_{(M)} = \mathbf{F}^{pT} \nabla_{(I)}$ を用いて定義される第1中間配置における回転を表す。式(2.121)第2等式における右辺第1項および第2項を最左辺に移項すれば、

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)} - \mathbf{L}_{(M)}^p \boldsymbol{\alpha}_{(M)} - \boldsymbol{\alpha}_{(M)} \mathbf{L}_{(M)}^{pT} = -\text{curl}_{(M)} \mathbf{L}_{(M)}^p \dots \dots \dots (2.122)$$

と書ける。ここで、式(2.122)左辺は次式で定義される移流速度を $\mathbf{L}_{(M)}^p$ としたOldroyd形の客観速度 $\hat{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)}$ であることがわかる[補足A.5参照]。すなわち、

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)} \equiv \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)} - \mathbf{L}_{(M)}^p \boldsymbol{\alpha}_{(M)} - \boldsymbol{\alpha}_{(M)} \mathbf{L}_{(M)}^{pT} \dots \dots \dots (2.123)$$

と表記すれば、式(2.122)および式(2.123)より次の関係が導かれる。

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)} = -\text{curl}_{(M)} \mathbf{L}_{(M)}^p \dots \dots \dots (2.124)$$

また、初期配置 $\beta_{(I)}$ および第1中間配置 $\beta_{(M)}$ において結晶基底は一様と仮定すれば、式(2.124)右辺は式(2.99)を用いると次のように書ける。

$$-\text{curl}_{(M)} \mathbf{L}_{(M)}^p = -\text{curl}_{(M)} \left( \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right) = \sum_{\alpha} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \left( \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \times \nabla_{(M)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (2.125)$$

また、転位は各すべり系においてすべり面上に存在するため、すべり面法線ベクトル $\mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)}$ をすべり方向ベクトル $\mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)}$ および単位従法線ベクトル $\mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)}$ を用いて

$$\mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} = \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \times \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.126)$$

と表示した場合には式(2.125)は

$$-\text{curl}_{(M)} \mathbf{L}_{(M)}^p = \sum_{\alpha} \left[ \left( \nabla_{(M)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} - \left( \nabla_{(M)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right] \dots \dots \dots (2.127)$$

と書ける。したがって、式(2.124)および式(2.127)より、 $\hat{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)}$ に対して次のようにすべり系ごとの値で記述した結晶塑性論的表現が可能となる。

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)} = \sum_{\alpha} \left[ \left( \nabla_{(M)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} - \left( \nabla_{(M)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right] \dots \dots \dots (2.128)$$

また, Gurtin<sup>(91)</sup> はらせん転位密度および刃状転位密度の蓄積速度  $\dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)}$  および  $\dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)}$  をそれぞれ次式で定義している.

$$\left. \begin{aligned} \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} &= \frac{1}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \nabla_{(M)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \\ \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} &= -\frac{1}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \nabla_{(M)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (2.129)$$

ここで,  $\tilde{b}^{(\alpha)}$  は Burgers ベクトルの大きさである. なお, Gurtin<sup>(91)</sup> は式(2.129)において右辺を  $\tilde{b}^{(\alpha)}$  で除していないため  $\rho_{G(s)}^{(\alpha)}$  および  $\rho_{G(e)}^{(\alpha)}$  は材料科学における転位密度の次元 [ $\text{m}^{-2}$ ] となっていないのに対して, ここでは  $\tilde{b}^{(\alpha)}$  で除すことで材料科学における転位密度の次元と整合するようにしている. また, 従法線  $\mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)}$  の配置変換則は, 式(2.126)より  $\mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)}$  と同様に表されねばならないため, 式(2.102)より次式で与えられる.

$$\mathbf{t}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^c \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} = \mathbf{F}^* \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} = \mathbf{F}^* \mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.130)$$

したがって, 式(2.129)は次式のように現配置  $\beta_{(c)}$  および初期配置  $\beta_{(l)}$  の量を用いてそれぞれ表すことができる.

$$\left. \begin{aligned} \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} &= \frac{1}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)} = \frac{1}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \nabla_{(l)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot (\mathbf{F}^{p-1} \mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)}) \\ \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} &= -\frac{1}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)} = -\frac{1}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \nabla_{(l)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot (\mathbf{F}^{p-1} \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)}) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (2.131)$$

ただし, ナブラの配置変換則  $\nabla = \mathbf{F}^{*-T} \nabla_{(M)}$  を用いている. したがって, 式(2.128)は

$$\dot{\alpha}_{(M)} = \sum_{\alpha} \left( \tilde{b}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} + \tilde{b}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \dots\dots\dots (2.132)$$

と書ける. 以上の議論を図示すると図2.9のようになる. ここで, 同図に示す  $x_1 x_2 x_3$  座標系は  $x_1 x_3$  面が  $\alpha$  すべり面に一致し, すべり方向  $\mathbf{s}^{(\alpha)}$  が  $x_1$  と一致するように設定した局所座標系(結晶座標系)を表す. 例えば, 図2.9(b)に示すような Burgers 回路をとれば, 回路内に存在する転位密度の蓄積速度は正の刃状 GN 転位密度  $\dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)}$  となる.

なお, Shizawa-Zbib<sup>(75)</sup> は上述の  $\dot{\alpha}_{(M)}$  を GN 転位の運動速度を表す GN 転位ドリフト速度  $\mathbf{Z}_{(M)}$  と称している. そこで本研究では, Shizawa-Zbib<sup>(75)</sup> に従い  $\dot{\alpha}_{(M)}$  を

$$\mathbf{Z}_{(M)} \equiv \dot{\alpha}_{(M)} \dots\dots\dots (2.133)$$

と表示しなす. ここで, 式(2.133)の GN 転位ドリフト速度を時間積分すると次式を得る.

$$\bar{\alpha}_{(M)} \equiv \int \mathbf{Z}_{(M)} dt = \int \dot{\alpha}_{(M)} dt \quad \text{or} \quad \dot{\bar{\alpha}}_{(M)} \equiv \mathbf{Z}_{(M)} = \dot{\alpha}_{(M)} \dots\dots\dots (2.134)$$

ただし, 式(2.123)の関係より次式が成り立つ.

$$\bar{\alpha}_{(M)} \neq \alpha_{(M)} \dots\dots\dots (2.135)$$

したがって,  $\bar{\alpha}_{(M)}$  は式(2.98)で示した塑性ひずみ  $\bar{\mathbf{E}}_{(m)}^p$  と同様に経路依存の変形尺度といえる. また, 式(2.128)および式(2.134)より

$$\bar{\alpha}_{(M)} = \sum_{\alpha} \left( \tilde{b}^{(\alpha)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} + \tilde{b}^{(\alpha)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \dots\dots\dots (2.136)$$



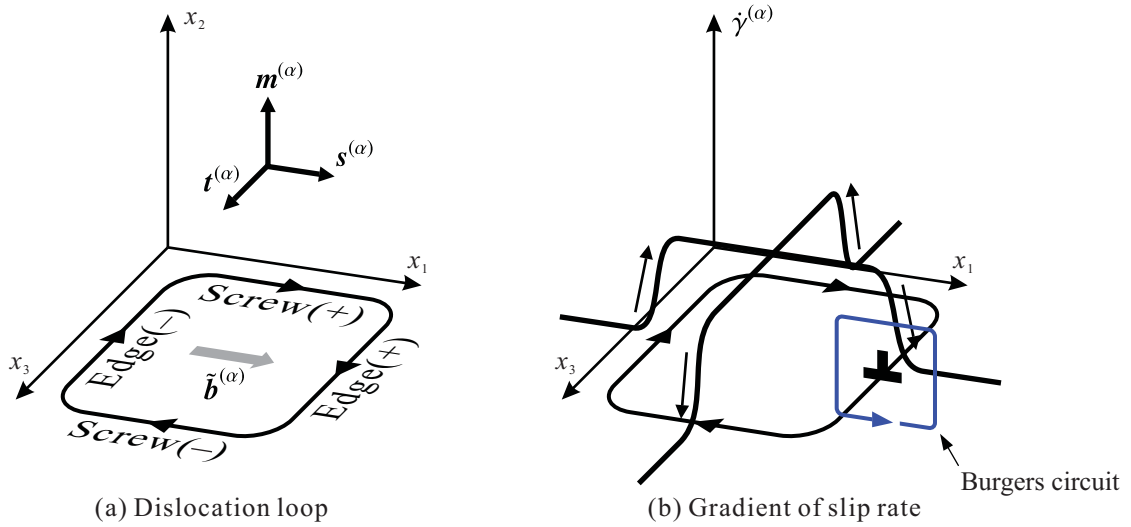


Fig. 2.9 Local coordinate system and crystal bases<sup>(93)</sup>.

となる．ただし， $\rho_{G(s)}^{(\alpha)}$  および  $\rho_{G(e)}^{(\alpha)}$  は次式にて定義される現時刻における GN 転位密度のらせん成分および刃状成分である．

$$\left. \begin{aligned} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} &= \int \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} dt \\ \rho_{G(e)}^{(\alpha)} &= \int \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} dt \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (2.137)$$

ただし，本研究では初期配置  $\beta_{(1)}$  および時刻  $t = 0$  において長範囲応力場を形成するような孤立転位は存在しないと仮定して， $\rho_{G(s)}^{(\alpha)}$  および  $\rho_{G(e)}^{(\alpha)}$  の初期値を零としている．また，式 (2.134) における各テンソルは次のようにすべり系ごとの量に分解できる．

$$\mathbf{Z}_{(M)} = \sum_{\alpha} \mathbf{Z}_{(M)}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \dot{\bar{\alpha}}_{(M)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.138)$$

ここで，式 (2.134)<sub>2</sub> および式 (2.132) より

$$\mathbf{Z}_{(M)}^{(\alpha)} = \dot{\bar{\alpha}}_{(M)}^{(\alpha)} = \tilde{b}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} + \tilde{b}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.139)$$

および式 (2.136) より

$$\bar{\alpha}_{(M)}^{(\alpha)} = \tilde{b}^{(\alpha)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} + \tilde{b}^{(\alpha)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.140)$$

である．

また，GN 転位ドリフト速度  $\mathbf{Z}$  の配置変換則は次式で与えられる<sup>(75)</sup>．

$$\mathbf{Z} = \mathbf{R}^* \mathbf{Z}_{(m)} \mathbf{R}^{*\text{T}} = \mathbf{J}^{\text{e}-1} \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^{\text{e}} \mathbf{Z}_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{\text{eT}} \mathbf{R}^{*\text{T}} = \mathbf{J}^{\text{e}-1} \mathbf{F}^* \mathbf{Z}_{(M)} \mathbf{F}^{*\text{T}} \dots \dots \dots (2.141)$$

したがって、各配置における転位ドリフト速度はそれぞれ次式で定義できる [補足 A.6 参照].

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{Z} &\equiv \dot{\boldsymbol{\alpha}} - \mathbf{L}\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}\mathbf{L}^T + (\text{tr } \mathbf{L})\boldsymbol{\alpha} \\ &= \sum_{\alpha} J^{e-1} \tilde{\mathbf{b}}^{(\alpha)} \left( \dot{\rho}_{\text{G(s)}}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)} + \dot{\rho}_{\text{G(e)}}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}^{(\alpha)} \right) \\ \mathbf{Z}_{(m)} &\equiv \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)} - \left( \mathbf{L}_{(m)}^e \mathbf{S} + \mathbf{L}_{(m)}^p \right) \boldsymbol{\alpha}_{(m)} - \boldsymbol{\alpha}_{(m)} \left( \mathbf{L}_{(m)}^e \mathbf{S} + \mathbf{L}_{(m)}^p \right)^T + (\text{tr } \mathbf{L}) \boldsymbol{\alpha}_{(m)} \\ &= \sum_{\alpha} J^{e-1} \tilde{\mathbf{b}}^{(\alpha)} \left( \dot{\rho}_{\text{G(s)}}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} + \dot{\rho}_{\text{G(e)}}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (2.142)$$

また、微小弾性変形の仮定を用いると式 (2.141) は次式のように近似できる.

$$\mathbf{Z} = \mathbf{R}^* \mathbf{Z}_{(m)} \mathbf{R}^{*T} \approx \mathbf{R}^* \mathbf{Z}_{(M)} \mathbf{R}^{*T}, \quad \mathbf{Z}_{(m)} \approx \mathbf{Z}_{(M)} \dots \dots \dots (2.143)$$

さらに、第2中間配置  $\beta_{(m)}$  における GN 転位ドリフト速度の時間積分を

$$\bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)} \equiv \int \mathbf{Z}_{(m)} dt \dots \dots \dots (2.144)$$

と定義した場合、式 (2.134) および式 (2.143)<sub>2</sub> より

$$\bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)} \approx \bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)} \dots \dots \dots (2.145)$$

と書ける. したがって、構成式の参照配置となる第2中間配置において  $\bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)}$  は

$$\bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)} = \sum_{\alpha} \left( \tilde{\mathbf{b}}^{(\alpha)} \rho_{\text{G(s)}}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} + \tilde{\mathbf{b}}^{(\alpha)} \rho_{\text{G(e)}}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (2.146)$$

となる. また、式 (2.44)<sub>2</sub> に微小弾性変形の仮定を用いると

$$\mathbf{L}_{(m)}^p \approx \mathbf{L}_{(M)}^p \dots \dots \dots (2.147)$$

と近似できるため、上式と式 (2.124) および式 (2.143)<sub>2</sub> より

$$\mathbf{Z}_{(m)} \approx -\text{curl}_{(m)} \mathbf{L}_{(m)}^p \dots \dots \dots (2.148)$$

と書ける.

最後に、転位-結晶塑性論における GN 転位密度の導入方法について簡単に述べる. 転位-結晶塑性論では加工硬化を記述するためにスカラの硬化則を考える. その際、転位の切り合いなどの相互作用を表現するために、スカラの転位密度が必要となる. そこで本研究では、 $\alpha$  すべり系の正味の GN 転位密度として

$$\rho_{\text{G}}^{(\alpha)} \equiv \frac{1}{\tilde{\mathbf{b}}^{(\alpha)}} \left\| \bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)}^{(\alpha)} \right\| = \sqrt{\left( \rho_{\text{G(s)}}^{(\alpha)} \right)^2 + \left( \rho_{\text{G(e)}}^{(\alpha)} \right)^2} \dots \dots \dots (2.149)$$

を用いる. すなわち、式 (2.137) の GN 転位密度のらせん成分と刃状成分の2乗和として表される. 本研究では、式 (2.149) で定義した  $\rho_{\text{G}}^{(\alpha)}$  を4章にて述べる硬化則に導入する.

また、式 (2.149) と同様に正味の GN 転位ドリフト速度を次式にて定義する.

$$\bar{\dot{\rho}}_{\text{G}}^{(\alpha)} \equiv \frac{1}{\tilde{\mathbf{b}}^{(\alpha)}} \left\| \mathbf{Z}_{(M)}^{(\alpha)} \right\| = \sqrt{\left( \dot{\rho}_{\text{G(s)}}^{(\alpha)} \right)^2 + \left( \dot{\rho}_{\text{G(e)}}^{(\alpha)} \right)^2} \dots \dots \dots (2.150)$$

ただし、 $\overline{\dot{\rho}}_G^{(\alpha)}$  は式 (2.149) の物質時間微分ではないこと ( $\overline{\dot{\rho}}_G^{(\alpha)} \neq \dot{\rho}_G^{(\alpha)}$ ) に注意されたい。ここで、任意のスカラ  $a$  に対して、 $\alpha$  すべり面内の接線方向こう配を

$$\nabla^{(\alpha)} a \equiv \nabla a - (\nabla a \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)}) \mathbf{m}^{(\alpha)} = (\nabla a \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)}) \mathbf{s}^{(\alpha)} + (\nabla a \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)}) \mathbf{t}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.151)$$

と定義する<sup>(53)(94)</sup>。式 (2.151) の演算子  $\nabla^{(\alpha)}$  を用いると、式 (2.131) より式 (2.150) は次式のように表示できる。

$$\overline{\dot{\rho}}_G^{(\alpha)} = \frac{1}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \sqrt{(\nabla^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}) \cdot (\nabla^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)})} \dots \dots \dots (2.152)$$

この関係式は 4.3 節にて使用する。

### 2.7.3 SS 転位密度

SS 転位密度は単位体積あたりの転位ループの全長を表し、図 2.10 に示すような平坦なすべり面を考えた場合、次式のように与えられる<sup>(61)</sup>[補足 A.7 参照]。

$$\dot{\rho}_S^{(\alpha)} = \frac{c^{(\alpha)}}{\tilde{b}^{(\alpha)} L^{(\alpha)}} |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| \dots \dots \dots (2.153)$$

ここで、 $c^{(\alpha)}$  は図 2.10 に示すような矩形近似した転位ループの辺長比を表す数値係数であり<sup>(95)</sup>、次式で定義される。

$$c^{(\alpha)} \equiv \frac{(1 + \kappa^{(\alpha)})^2}{2\kappa^{(\alpha)}} \dots \dots \dots (2.154)$$

したがって、 $c^{(\alpha)}$  は通常 1 オーダの係数となり、転位ループを正方形と近似した場合には  $c^{(\alpha)} = 2$  となる。また、式 (2.153) における  $L^{(\alpha)}$  は転位の平均飛行距離であり、その詳細は 4.3 節にて述べる。なお、一般に SS 転位密度は式 (2.153) 右辺に転位の対消滅密度  $\rho_{\text{rec}}^{(\alpha)}$  を加えて

$$\dot{\rho}_S^{(\alpha)} = \frac{c^{(\alpha)}}{\tilde{b}^{(\alpha)} L^{(\alpha)}} |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| - \dot{\rho}_{\text{rec}}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.155)$$

のように定義されることが多い<sup>(52)(96)~(98)</sup>。ただし、転位の対消滅は高温または大きなひずみを受けた場合に生じるのに対して、本研究では 7 章の数値解析において室温下および高々 1~5% 程度の変形を想定する。そこで、本研究では簡単のために転位の対消滅現象は考慮しない。また、現時点における SS 転位密度を式 (2.153) の時間積算量として次式で与えられる。

$$\rho_S^{(\alpha)} = \rho_0^{(\alpha)} + \int \dot{\rho}_S^{(\alpha)} dt \dots \dots \dots (2.156)$$

ここで、 $\rho_0^{(\alpha)}$  は変形前から材料内に存在する初期転位密度であり、本研究では  $\rho_0^{(\alpha)}$  は転位対の密度のみを表すものとする。

以上は一般的な SS 転位密度の定義であるが、本研究ではこれらの定義に対して 4.3 節にて若干の修正を施す。

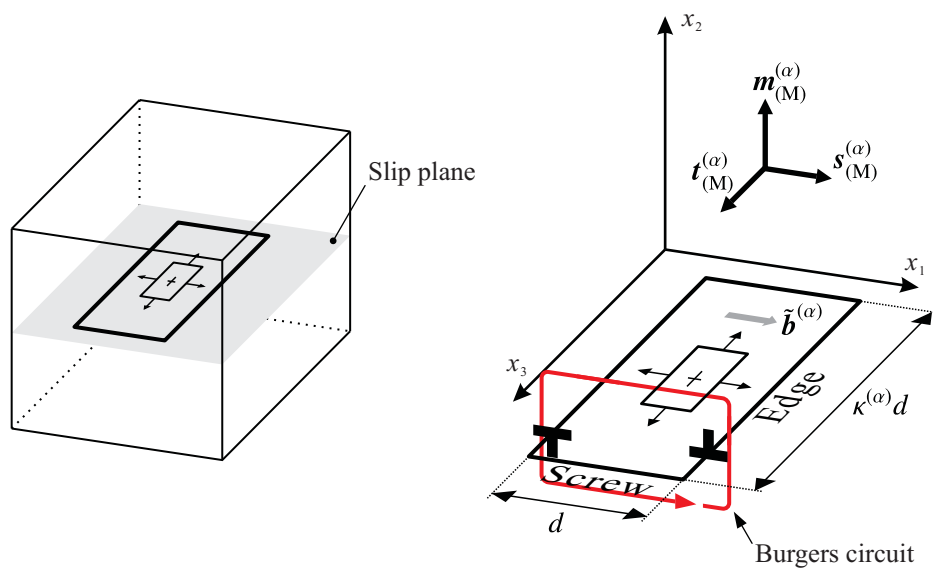


Fig. 2.10 Rectangular dislocation loop.

## 3章

# 保存則と材料の変形に対する熱力学

本章では、まず構成式の参照配置である第2中間配置 $\beta_{(m)}$ における全自由エネルギーを定義する。ここで、全自由エネルギーは可逆過程において発生する保存エネルギーと非可逆過程において発生する散逸エネルギーの和として表される。続いて、各種保存則およびエントロピー増大則を導出する。その際、定義した全自由エネルギーに基づく仮想仕事率の原理から力学的保存則および自然境界条件を導く。また、熱力学第1法則からエネルギー保存則を、熱力学第2法則からエントロピー不等式をそれぞれ導出する。

本章の後半では、Clausius-Duhemの不等式に基づいて全自由エネルギーの保存部分および散逸部分をそれぞれ形成する各共役量に対する熱力学的制限を述べる。その際、保存部分に対する熱力学的制限から応力の構成式の一般形を導出し、散逸部分に対する熱力学的制限から高次応力の構成式の一般形および有効応力の適切な引数を導く。

### 3.1 熱力学的力の定義

構成式の参照配置となる第2中間配置 $\beta_{(m)}$ において全自由エネルギー $\bar{\psi}^{[l]}$ を定義する。ここで、全自由エネルギーは従来の自由エネルギーのみでなく、全過程において発生するエネルギーを表す。すなわち、全自由エネルギーは可逆過程において発生する保存エネルギー $\psi^{[c]}$ と非可逆過程において発生する散逸エネルギー $\bar{\psi}^{[d]}$ に次のように分解される。

$$\bar{\psi}^{[l]} = \rho_{(l)} \bar{\psi}^{[l]} = \psi^{[c]} + \bar{\psi}^{[d]} \dots \dots \dots (3.1)$$

ここで、 $\rho_{(l)}$ は初期配置 $\beta_{(l)}$ における質量密度、 $\bar{\psi}^{[l]}$ は単位質量当たりの全自由エネルギーを表し、 $\psi^{[c]}$ はHelmholtzの自由エネルギーである。なお、本研究では2.5.1項で述べた微小弾性変形の仮定に基づき、初期配置における質量密度 $\rho_{(l)}$ と第2中間配置における質量密度 $\rho_{(m)}$ を等値している( $\rho_{(l)} = \rho_{(m)}$ )。また、以降では $(\bullet)^{[c]}$ および $(\bullet)^{[d]}$ はそれぞれ任意の量 $(\bullet)$ の保存部分および散逸部分を表すものとする。さらに、2.5.3項と同様に経路依存の回復不可能な量を $\overline{(\bullet)}$ と記す。

本研究では、弾・粘塑性変形問題を対象として全自由エネルギーの引数を次のように与える。

$$\bar{\psi}^{[l]} = \bar{\psi}^{[l]}(\vartheta, \mathbf{E}_{(m)}^e, \overline{\mathbf{E}}_{(m)}^p, \bar{\alpha}_{(m)}, \bar{\mathbf{p}}_{(m)}; \mathbf{D}_{(m)}^p) \dots \dots \dots (3.2)$$

ここで、 $\vartheta$  は絶対温度 ( $\vartheta \geq 0$ ),  $\bar{\mathbf{p}}_{(m)}$  は第2中間配置における熱流束  $\mathbf{q}_{(m)}$  を用いて

$$\bar{\mathbf{p}}_{(m)} \equiv \int \mathbf{q}_{(m)} dt \quad \text{or} \quad \dot{\bar{\mathbf{p}}}_{(m)} = \mathbf{q}_{(m)} \dots \dots \dots (3.3)$$

と定義される経路依存の時間積算量である. また, 式(3.2)右辺におけるセミコロン「;」より左側の引数は外部制御が可能な変数 (巨視的変数), 「;」より右側の引数は外部制御不可能な内部変数を表している. ここで, 内部変数は現変形状態までの履歴依存性を表現するために導入される量である<sup>(79)(81)(99)~(101)</sup>. 本研究では, 後述するように塑性変形の駆動力となる有効応力を粘塑性形に拡張するために内部変数に  $\mathbf{D}_{(m)}^p$  を選択する<sup>(102)</sup>.

式(3.2)の全自由エネルギーの物質時間微分をとると

$$\begin{aligned} \dot{\bar{\Psi}}^{[l]} &= \dot{\bar{\Psi}}^{[l]}(\vartheta, \mathbf{E}_{(m)}^e, \bar{\mathbf{E}}_{(m)}^p, \bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)}, \bar{\mathbf{p}}_{(m)}; \mathbf{D}_{(m)}^p) \\ &= \frac{\partial \bar{\Psi}^{[l]}}{\partial \vartheta} \dot{\vartheta} + \frac{\partial \bar{\Psi}^{[l]}}{\partial \mathbf{E}_{(m)}^e} \cdot \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \frac{\partial \bar{\Psi}^{[l]}}{\partial \bar{\mathbf{E}}_{(m)}^p} \cdot \dot{\bar{\mathbf{E}}}_{(m)}^p + \frac{\partial \bar{\Psi}^{[l]}}{\partial \bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)}} \cdot \dot{\bar{\boldsymbol{\alpha}}}_{(m)} + \frac{\partial \bar{\Psi}^{[l]}}{\partial \bar{\mathbf{p}}_{(m)}} \cdot \dot{\bar{\mathbf{p}}}_{(m)} + \frac{\partial \bar{\Psi}^{[l]}}{\partial \mathbf{D}_{(m)}^p} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p \\ &\equiv -\tilde{H}\dot{\vartheta} + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^e + \tilde{\hat{\mathbf{T}}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p + \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \mathbf{Z}_{(m)} - \tilde{\mathbf{g}}_{(m)} \cdot \mathbf{q}_{(m)} + \tilde{\mathbf{M}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p \dots \dots \dots (3.4) \end{aligned}$$

となる. ただし, 最後の定義式では式(2.97), 式(2.144)および式(3.3)の関係を用いており, 各引数に共役な熱力学的力をそれぞれ次のように定義している.

$$\left. \begin{aligned} \tilde{H} &= JH \equiv -\frac{\partial \bar{\Psi}^{[l]}}{\partial \vartheta}, & \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} &= J\mathbf{T}_{(m)} \equiv \frac{\partial \bar{\Psi}^{[l]}}{\partial \mathbf{E}_{(m)}^e}, & \tilde{\hat{\mathbf{T}}}_{(m)} &= J\hat{\mathbf{T}}_{(m)} \equiv \frac{\partial \bar{\Psi}^{[l]}}{\partial \bar{\mathbf{E}}_{(m)}^p}, \\ \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} &= J\mathbf{N}_{(m)} \equiv \frac{\partial \bar{\Psi}^{[l]}}{\partial \bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)}}, & \tilde{\mathbf{g}}_{(m)} &= J\mathbf{g}_{(m)} \equiv -\frac{\partial \bar{\Psi}^{[l]}}{\partial \bar{\mathbf{p}}_{(m)}}, & \tilde{\mathbf{M}}_{(m)} &= J\mathbf{M}_{(m)} \equiv \frac{\partial \bar{\Psi}^{[l]}}{\partial \mathbf{D}_{(m)}^p} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (3.5)$$

ここで,  $\tilde{(\bullet)}$  は  $(\bullet)$  に  $J = \det \mathbf{F} = \rho_{(l)}/\rho$  を乗じた量を表し,  $H$  はエントロピー,  $\mathbf{g}_{(m)}$  は後述する温度こう配である. また,  $\mathbf{T}_{(m)}$  は弾性変形の駆動力,  $\hat{\mathbf{T}}_{(m)}$  は塑性変形の駆動力,  $\mathbf{N}_{(m)}$  はGN転位運動の駆動力に相当する高次応力,  $\mathbf{M}_{(m)}$  は塑性変形速度に共役な微視的な応力である. 従来の理論では  $\bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)}$  を内部変数として扱っているのに対して, 本研究で構築する高次理論では  $\bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)}$  が外部制御可能であり陽に仕事をなすと考える.

続いて, 式(3.1)および式(3.2)に基づいて全自由エネルギーの引数の役割を次のように表す.

$$\bar{\Psi}^{[l]} = \Psi^{[c]}(\vartheta, \mathbf{E}_{(m)}^e; \mathbf{D}_{(m)}^p) + \bar{\Psi}^{[d]}(\bar{\mathbf{E}}_{(m)}^p, \bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)}, \bar{\mathbf{p}}_{(m)}; \mathbf{D}_{(m)}^p) \dots \dots \dots (3.6)$$

ここで,  $\vartheta$  および  $\mathbf{E}_{(m)}^e$  は状態量であるため保存仕事を,  $\bar{\mathbf{E}}_{(m)}^p$ ,  $\bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)}$  および  $\bar{\mathbf{p}}_{(m)}$  は回復不可能な経路依存量であるため散逸仕事をそれぞれなすと考えている. また,  $\mathbf{D}_{(m)}^p$  は内部変数であるため全仕事に寄与する.

## 3.2 各種保存則とエントロピー増大則

本節では, 質量保存則, 力学的保存則およびエネルギー保存則の各種保存則を導くとともにエントロピー増大則を導出する.

### 3.2.1 質量保存則

質量保存則は次式のように書ける<sup>(80)</sup>.

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}} \rho \, dv = 0 \dots\dots\dots (3.7)$$

ここで、 $\rho$ は現配置 $\beta_{(c)}$ における質量密度であり、 $D(\bullet)/Dt$ は物質時間微分演算子である。また、 $\mathcal{V}$ および $dv$ はそれぞれ現配置における物質体積および微小体積要素である。式(3.7)に Reynolds の輸送定理<sup>(80)</sup>を適用した後に局所化すれば次式を得る。

$$\dot{\rho} + \rho \operatorname{div} \boldsymbol{v} = 0 \dots\dots\dots (3.8)$$

ここで、 $\boldsymbol{v}$ は物質点の速度である。式(3.8)は一般に連続の式と呼ばれる。

### 3.2.2 力学的保存則と境界条件

局所形の力学的保存則を導出するために、前節で定義した全自由エネルギーに基づく仮想仕事率の原理を導く。仮想仕事率の原理は、内力のなす仮想仕事率は表面に作用する力（表面力）および物体に作用する力（物体力）を合わせた外力のなす仮想仕事率に等しいことを述べ、次式のように表される。

$$\int_{\mathcal{V}} \check{P} \, dv = \oint_{\mathcal{S}} \check{P}_s \, da + \int_{\mathcal{V}} \check{P}_b \, dv \dots\dots\dots (3.9)$$

ここで、 $(\check{\bullet})$ は仮想量を表し、 $\check{P}$ 、 $\check{P}_s$ および $\check{P}_b$ はそれぞれ現配置における内力による仮想仕事率、表面力による仮想仕事率および物体力による仮想仕事率である。また、 $\mathcal{S}$ および $da$ はそれぞれ体積 $\mathcal{V}$ を囲う物質表面および微小面積要素である。内力のなす仮想仕事率は等温過程において式(3.4)の引数を仮想量に置き換えたものに等しいため<sup>(75)</sup>、次式のように書ける。

$$\begin{aligned} \check{P} &= \rho \check{\psi}^{[1]} \Big|_{\theta} = J^{-1} \check{\Psi}^{[1]} \Big|_{\theta} \\ &= \boldsymbol{T}_{(m)} \cdot \check{\boldsymbol{D}}_{(m)}^e + \hat{\boldsymbol{T}}_{(m)} \cdot \check{\boldsymbol{D}}_{(m)}^p + \boldsymbol{N}_{(m)} \cdot \check{\boldsymbol{Z}}_{(m)} \\ &= \boldsymbol{T} \cdot \check{\boldsymbol{D}}^e + \hat{\boldsymbol{T}} \cdot \check{\boldsymbol{D}}^p + \boldsymbol{N} \cdot \check{\boldsymbol{Z}} \dots\dots\dots (3.10) \end{aligned}$$

ただし、式(3.10)の2行目から3行目への変形では、仮想量に対しても現実量と同様の運動学が成立すると考えて式(2.90)、式(2.92)および式(2.143)を用いており、現配置における各熱力学的力をそれぞれ次式で定義している。

$$\boldsymbol{T} \equiv \boldsymbol{R}^* \boldsymbol{T}_{(m)} \boldsymbol{R}^{*T}, \quad \hat{\boldsymbol{T}} \equiv \boldsymbol{R}^* \hat{\boldsymbol{T}}_{(m)} \boldsymbol{R}^{*T}, \quad \boldsymbol{N} \equiv \boldsymbol{R}^* \boldsymbol{N}_{(m)} \boldsymbol{R}^{*T} \dots\dots\dots (3.11)$$

また、等温過程を考えるため $\boldsymbol{q}_{(m)} = \mathbf{0}$ となり、さらに内部変数は陽に仕事をしないため<sup>(100)</sup>、これらの量がなす仮想仕事率は式(3.10)には現れない。ただし、内部変数 $\check{\boldsymbol{D}}_{(m)}^p$ は保存過程および散逸過程単独ではそれぞれ仕事をなし、次式の関係を有する。

$$\tilde{\boldsymbol{M}}_{(m)} \cdot \check{\boldsymbol{D}}_{(m)}^p = (\tilde{\boldsymbol{M}}_{(m)}^{[c]} + \tilde{\boldsymbol{M}}_{(m)}^{[d]}) \cdot \check{\boldsymbol{D}}_{(m)}^p = 0 \quad \text{or} \quad \tilde{\boldsymbol{M}}_{(m)}^{[c]} = -\tilde{\boldsymbol{M}}_{(m)}^{[d]} \dots\dots\dots (3.12)$$



続いて、外力のなす仮想仕事率について Shizawa-Zbib<sup>(75)</sup> は  $\dot{P}_s$  および  $\dot{P}_b$  をそれぞれ次式の形で与えている.

$$\dot{P}_s = \dot{\mathbf{t}} \cdot \dot{\mathbf{v}} + \dot{\mathbf{N}} \cdot \dot{\mathbf{L}}^p \dots \dots \dots (3.13)$$

$$\dot{P}_b = \rho(\mathbf{f} - \dot{\mathbf{v}}) \cdot \dot{\mathbf{v}} \dots \dots \dots (3.14)$$

ここで、 $\dot{\mathbf{t}}$  は通常の表面力、 $\dot{\mathbf{N}}$  は  $\mathbf{N}$  と関連付けられる高次表面力、 $\mathbf{f}$  は物体力である. 式(3.13)右辺第1項は従来の連続体力学で記述される表面力のなす仮想仕事率<sup>(103)</sup>, 第2項は高次応力理論で新たに導入される高次表面力のなす仮想仕事率をそれぞれ表している. また, 式(3.14)の物体力のなす仮想仕事率は, 従来と同じく物質体積に作用する外力の仮想仕事率から慣性力項を差し引いた形で表される. 本研究では, 外力のなす仮想仕事率として式(3.13)および式(3.14)の定義を採用する. なお, Gurtin<sup>(53)</sup> は  $\dot{P}_b$  には高次物体力のなす仮想仕事率は考慮不要なことを示している. 第2中間配置  $\beta_{(m)}$  において  $\dot{P}$  は式(2.148)より次のように式変形できる.

$$\dot{P} = \mathbf{T}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^e + \hat{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p - \mathbf{N}_{(m)} \cdot \text{curl}_{(m)} \dot{\mathbf{L}}_{(m)}^p \dots \dots \dots (3.15)$$

ここで, 式(3.15)右辺第3項を式(2.101)<sub>2</sub>を用いて次のように変形する.

$$\begin{aligned} -\mathbf{N}_{(m)} \cdot \text{curl}_{(m)} \dot{\mathbf{L}}_{(m)}^p &= -N_{(m)\hat{\alpha}\hat{\beta}} e_{\hat{\beta}\hat{\delta}\hat{\varepsilon}} \dot{L}_{(m)\hat{\alpha}\hat{\delta},\hat{\varepsilon}}^p = N_{(m)\hat{\alpha}\hat{\beta}} e_{\hat{\beta}\hat{\delta}\hat{\varepsilon}} \dot{L}_{(m)\hat{\alpha}\hat{\delta},\hat{\varepsilon}}^p = N_{(m)\hat{\alpha}\hat{\beta}} e_{\hat{\beta}\hat{\delta}\hat{\varepsilon}} \left( \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(m)\hat{\alpha}}^{(\alpha)} \hat{m}_{(m)\hat{\delta}}^{(\alpha)} \right)_{,\hat{\varepsilon}} \\ &= \sum_{\alpha} N_{(m)\hat{\alpha}\hat{\beta}} e_{\hat{\beta}\hat{\delta}\hat{\varepsilon}} s_{(m)\hat{\alpha}}^{(\alpha)} \hat{m}_{(m)\hat{\delta}}^{(\alpha)} \dot{\gamma}_{,\hat{\varepsilon}}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \xi_{(m)\hat{\varepsilon}}^{(\alpha)} \dot{\gamma}_{,\hat{\varepsilon}}^{(\alpha)} \\ &= \sum_{\alpha} \xi_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \nabla_{(m)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.16) \end{aligned}$$

ただし, 初期配置において結晶基底は一様と仮定するとともに微小弾性変形の仮定を適用することで基底  $s_{(m)}^{(\alpha)}$ ,  $m_{(m)}^{(\alpha)}$  のこう配を無視している. また, 式(3.16)の5番目の等式においてすべり速度こう配に共役な力を

$$\xi_{(m)\hat{\varepsilon}}^{(\alpha)} \equiv N_{(m)\hat{\alpha}\hat{\beta}} e_{\hat{\beta}\hat{\delta}\hat{\varepsilon}} s_{(m)\hat{\alpha}}^{(\alpha)} \hat{m}_{(m)\hat{\delta}}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.17)$$

と定義している. 式(3.17)で表される高次応力ベクトルは Gurtin<sup>(104)</sup> が導入した”microscopic stress”と同一のものであり, 式(3.17)に式(2.126)と同様に  $m_{(m)}^{(\alpha)} = \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \times s_{(m)}^{(\alpha)}$  の関係を適用すれば次式を得る.

$$\xi_{(m)}^{(\alpha)} = \left[ \mathbf{N}_{(m)} \cdot \left( s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes s_{(m)}^{(\alpha)} \right) \right] \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} - \left[ \mathbf{N}_{(m)} \cdot \left( s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \right] s_{(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.18)$$

すなわち,  $\xi_{(m)}^{(\alpha)}$  は  $\mathbf{Z}_{(m)}$  に共役な高次応力  $\mathbf{N}_{(m)}$  の  $\alpha$  すべり系への射影であり, すべり系ごとの GN 転位運動の駆動力とみなせる. また, 式(3.18)のように  $\xi_{(m)}^{(\alpha)}$  の作用する方向は  $\mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)}$  および  $s_{(m)}^{(\alpha)}$  の一次結合で表されるため,  $\xi_{(m)}^{(\alpha)}$  はすべり面内に限定されることがわかる. 式(3.15)および式(3.16)より, 内力のなす仮想仕事率  $\dot{P}$  は

$$\dot{P} = \mathbf{T}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^e + \hat{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p + \sum_{\alpha} \xi_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \nabla_{(m)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.19)$$

と表記でき、式 (3.19) 右辺の各変数を現配置へ push-forward すれば

$$\check{P} = \mathbf{T} \cdot \check{\mathbf{D}}^e + \hat{\mathbf{T}} \cdot \check{\mathbf{D}}^p + \sum_{\alpha} \xi^{(\alpha)} \cdot \nabla \check{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.20)$$

となる。ただし、微分演算子の配置変換則  $\nabla = \mathbf{R}^* \nabla_{(m)}$  を用いており、現配置における高次応力  $\xi^{(\alpha)}$  を次式で定義している。

$$\xi^{(\alpha)} \equiv \mathbf{R}^* \xi_{(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.21)$$

また、式 (2.48) および式 (2.111)<sub>1</sub> を用いて式 (3.20) は

$$\begin{aligned} \check{P} &= \mathbf{T} \cdot (\check{\mathbf{D}} - \check{\mathbf{D}}^p) + \hat{\mathbf{T}} \cdot \check{\mathbf{D}}^p + \sum_{\alpha} \xi^{(\alpha)} \cdot \nabla \check{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} = \mathbf{T} \cdot \check{\mathbf{D}} - (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}}) \cdot \check{\mathbf{D}}^p + \sum_{\alpha} \xi^{(\alpha)} \cdot \nabla \check{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} \\ &= \mathbf{T} \cdot \check{\mathbf{D}} - \sum_{\alpha} (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}}) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \check{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \xi^{(\alpha)} \cdot \nabla \check{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} \\ &= \mathbf{T} \cdot \check{\mathbf{D}} - \sum_{\alpha} (\tau^{(\alpha)} - \hat{\tau}^{(\alpha)}) \check{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \xi^{(\alpha)} \cdot \nabla \check{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} \\ &= \mathbf{T} \cdot \check{\mathbf{D}} - \sum_{\alpha} \tau_b^{(\alpha)} \check{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \xi^{(\alpha)} \cdot \nabla \check{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.22) \end{aligned}$$

と書ける。ここで、 $\mathbf{T}$  および  $\hat{\mathbf{T}}$  の  $\alpha$  すべり系への射影をそれぞれ次式で定義している。

$$\tau^{(\alpha)} \equiv \mathbf{T} \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.23)$$

$$\hat{\tau}^{(\alpha)} \equiv \hat{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.24)$$

また、 $\tau^{(\alpha)}$  と  $\hat{\tau}^{(\alpha)}$  の差を

$$\tau_b^{(\alpha)} \equiv \tau^{(\alpha)} - \hat{\tau}^{(\alpha)} = (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}}) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.25)$$

と定義する。後述するように  $\tau^{(\alpha)}$  は分解せん断応力、 $\hat{\tau}^{(\alpha)}$  は塑性変形の駆動力として各すべり系に有効的に働く分解有効応力である。また、式 (3.25) の最後の等式において  $\mathbf{T}_b \equiv \mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}}$  とおいた場合、 $\mathbf{T}_b$  は背応力（内部応力）に相当し、すべり系へのその射影である  $\tau_b^{(\alpha)}$  は分解背応力となる。式 (3.22) 最右辺第 1 項に式 (2.36)<sub>2</sub> および式 (2.45) を代入し部分積分を施せば

$$\begin{aligned} \check{P} &= \mathbf{T} \cdot (\text{grad } \check{\mathbf{v}} - \check{\mathbf{W}}) - \sum_{\alpha} \tau_b^{(\alpha)} \check{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \xi^{(\alpha)} \cdot \nabla \check{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} \\ &= \text{div} \left( \mathbf{T}^T \check{\mathbf{v}} + \sum_{\alpha} \xi^{(\alpha)} \check{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} \right) - \text{div} \mathbf{T} \cdot \check{\mathbf{v}} - \mathbf{T} \cdot \check{\mathbf{W}} - \sum_{\alpha} \tau_b^{(\alpha)} \check{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} - \sum_{\alpha} (\text{div } \xi^{(\alpha)}) \check{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.26) \end{aligned}$$

となる。

続いて、式 (3.13) 右辺第 2 項の高次表面力項を式 (2.101)<sub>1</sub> を用いて次式のように表現しなおす。

$$\check{\mathbf{N}} \cdot \check{\mathbf{L}}^p = \sum_{\alpha} \check{\mathbf{N}}^{(\alpha)} \cdot (\mathbf{P}^{(\alpha)} \check{\dot{\gamma}}^{(\alpha)}) = \sum_{\alpha} \check{\xi}^{(\alpha)} \check{\dot{\gamma}}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.27)$$

ここで,

$$\zeta^{(n)} \equiv \overset{(n)}{N} \cdot \mathbf{P}^{(n)} \dots \dots \dots (3.28)$$

は高次表面力  $\overset{(n)}{N}$  の  $\alpha$  すべり系への射影である.

式 (3.9) に式 (3.13), 式 (3.14), 式 (3.26) および式 (3.27) を代入し, Gauss の発散定理を適用すれば 仮想仕事率の原理は次式のように表される.

$$\oint_{\mathcal{S}} \left[ \left( \overset{(n)}{t} - \mathbf{T}\mathbf{n} \right) \cdot \dot{\mathbf{v}} + \sum_{\alpha} \left( \zeta^{(n)} - \xi^{(\alpha)} \cdot \mathbf{n} \right) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right] da + \int_{\mathcal{V}} \left\{ \left[ \text{div} \mathbf{T} + \rho(\mathbf{f} - \dot{\mathbf{v}}) \right] \cdot \dot{\mathbf{v}} + \mathbf{T} \cdot \dot{\mathbf{W}} + \sum_{\alpha} \left( \tau_b^{(\alpha)} + \text{div} \xi^{(\alpha)} \right) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right\} dv = 0 \dots \dots \dots (3.29)$$

ここで,  $\mathbf{n}$  は物質表面  $\mathcal{S}$  上の外向き単位法線ベクトルである. 式 (3.29) において仮想量の任意性を考慮すれば, 局所形の力学的保存則および力学的境界条件 (自然境界条件) がそれぞれ次のように得られる.

$$\text{in } \mathcal{V} : \left. \begin{aligned} \text{div } \mathbf{T} + \rho(\mathbf{f} - \dot{\mathbf{v}}) &= \mathbf{0} \\ \mathbf{T} &= \mathbf{T}^T \\ \tau_b^{(\alpha)} \equiv \tau^{(\alpha)} - \hat{\tau}^{(\alpha)} &= -\text{div } \xi^{(\alpha)} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (3.30)$$

$$\text{on } \mathcal{S} : \left. \begin{aligned} \overset{(n)}{t} &= \mathbf{T}\mathbf{n} \\ \zeta^{(n)} &= \xi^{(\alpha)} \cdot \mathbf{n} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (3.31)$$

式 (3.30)<sub>1</sub> および式 (3.30)<sub>2</sub> はそれぞれ従来の運動量保存則 (運動方程式) および角運動量保存則<sup>(80)</sup> である. したがって,  $\mathbf{T}$  は通常の Cauchy 応力であり, 式 (3.31)<sub>1</sub> は Cauchy の基本定理<sup>(80)</sup> であることがわかる. また, 式 (3.30)<sub>3</sub> は高次応力の釣合い方程式を表しており, 式 (3.31)<sub>2</sub> は高次応力の境界条件となる. すなわち, 高次応力を考慮した理論では, 従来の力学的保存則 (式 (3.30)<sub>1,2</sub>) および力学的境界条件 (式 (3.31)<sub>1</sub>) に高次応力の釣合い式および境界条件が新たに付与される. なお, 5章で述べるように高次応力の境界条件式 (3.31)<sub>2</sub> は, 物質境界面を通した GN 転位の流出入と密接に関連している.

一方, 式 (3.30) を体積積分し, 式 (3.31), 輸送定理および発散定理を用いれば全体形の力学的保存則が次式のように得られる.

$$\left. \begin{aligned} \oint_{\mathcal{S}} \overset{(n)}{t} da + \int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{f} dv - \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{v} dv &= \mathbf{0} \\ \oint_{\mathcal{S}} \mathbf{x} \times \overset{(n)}{t} da + \int_{\mathcal{V}} \mathbf{x} \times \rho \mathbf{f} dv - \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}} \mathbf{x} \times \rho \mathbf{v} dv &= \mathbf{0} \\ \oint_{\mathcal{S}} \zeta^{(n)} da + \int_{\mathcal{V}} \tau_b^{(\alpha)} dv &= 0 \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (3.32)$$

式 (3.32) は順に全体形の運動量保存則, 角運動量保存則および高次の運動量保存則である. ここでも, 式 (3.32)<sub>1,2</sub> は従来の理論<sup>(80)</sup> と同様に与えられ, 式 (3.32)<sub>3</sub> の高次運動量保存則が新たに導入される.

なお,  $\mathbf{T}$  が現変形状態における Cauchy 応力であることから, 式 (3.23) に示す  $\alpha$  すべり系へのその射影で定義される  $\tau^{(\alpha)}$  は通常の分解せん断応力といえる. また, 分解有効応力  $\hat{\tau}^{(\alpha)}$  は式 (3.25) より  $\hat{\tau}^{(\alpha)} = \tau^{(\alpha)} - \tau_b^{(\alpha)}$  と表される. すなわち, 外力由来の  $\tau^{(\alpha)}$  から転位等の結晶欠陥に起因して材料内部で発生する分解背応力  $\tau_b^{(\alpha)}$  を差し引いた形で与えられ, これが  $\alpha$  すべり系に有効的に働く内力となる. このことが  $\hat{\tau}^{(\alpha)}$  を分解「有効」応力と呼ぶ理由であり,  $\hat{\tau}^{(\alpha)}$  が塑性変形の駆動力となる. なお, 以降では断りなく  $\hat{\tau}^{(\alpha)}$  および  $\tau_b^{(\alpha)}$  を単に有効応力および背応力と略称することとする.

### 3.2.3 エネルギー保存則

全体形のエネルギー保存則あるいは熱力学第 1 法則は, 一般に次式のように表される<sup>(80)</sup>.

$$\frac{D}{Dt}(\mathcal{E} + \mathcal{K}) = \mathcal{P}^{\text{ext}} + \mathcal{Q} \dots \dots \dots (3.33)$$

ここで,  $\mathcal{E}$ ,  $\mathcal{K}$ ,  $\mathcal{P}^{\text{ext}}$  および  $\mathcal{Q}$  はそれぞれ内部エネルギー, 運動エネルギー, 外力によってなされる仕事率および熱によるエネルギー変化率を表し, それぞれ次式で定義される<sup>(80)</sup>.

$$\mathcal{E} \equiv \int_{\mathcal{V}} \rho \varepsilon \, dv \dots \dots \dots (3.34)$$

$$\mathcal{K} \equiv \int_{\mathcal{V}} \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \, dv \dots \dots \dots (3.35)$$

$$\mathcal{Q} \equiv - \oint_{\mathcal{S}} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, da + \int_{\mathcal{V}} \rho r \, dv \dots \dots \dots (3.36)$$

ここで,  $\varepsilon$  は内部エネルギー密度,  $\mathbf{q}$  および  $r$  はそれぞれ現配置における熱流束および放射熱密度 (または単位質量当たりの内部熱生成) である. また, 外力によってなされる仕事率  $\mathcal{P}^{\text{ext}}$  は, 式 (3.13) および式 (3.14) において仮想量を現実の量に置き換え, 慣性力項を取り去ることで次のように与えられる.

$$\mathcal{P}^{\text{ext}} \equiv \oint_{\mathcal{S}} \mathbf{t}^{(n)} \cdot \mathbf{v} \, da + \sum_{\alpha} \oint_{\mathcal{S}} \xi^{(n)(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, da + \int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, dv \dots \dots \dots (3.37)$$

ただし, 高次表面力項には式 (3.27) を用いている. また, 式 (3.9) より

$$\mathcal{P}^{\text{ext}} - \frac{D\mathcal{K}}{Dt} = \oint_{\mathcal{S}} P_s \, da + \int_{\mathcal{V}} P_b \, dv = \int_{\mathcal{V}} P \, dv \dots \dots \dots (3.38)$$

と書くことができる. ここで, 内力のなす仕事率  $P$  は, 式 (3.26) における仮想量を現実量に置き換え, 応力の対称性 (式 (3.30)<sub>2</sub>) を考慮すれば

$$P = \text{div} \left( \mathbf{T} \mathbf{v} + \sum_{\alpha} \xi^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right) - \text{div} \mathbf{T} \cdot \mathbf{v} - \sum_{\alpha} \tau_b^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} - \sum_{\alpha} (\text{div} \xi^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.39)$$

と表される. 以上の式 (3.34)~式 (3.36), 式 (3.38) および式 (3.39) を式 (3.33) に代入し, 輸送定理および発散定理を適用して局所化すれば次式が得られる.

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \tau_b^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \xi^{(\alpha)} \cdot \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} - \text{div} \mathbf{q} + \rho (r - \dot{\varepsilon}) = 0 \dots \dots \dots (3.40)$$

ただし、応力の対称性および式(2.48)を用いている。式(3.40)が高次理論における局所形のエネルギー保存則である。なお、従来の結晶塑性論<sup>(51)</sup>では高次応力を考慮していないため、式(3.40)において左辺第2項および第3項が消去される。また、式(2.111)<sub>1</sub>、式(3.23)および式(3.25)を適用すれば、式(3.40)は次のように書き換えられる。

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{D}^e + \sum_{\alpha} \hat{\tau}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \xi^{(\alpha)} \cdot \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} - \operatorname{div} \mathbf{q} + \rho(r - \dot{\varepsilon}) = 0 \dots\dots\dots (3.41)$$

### 3.2.4 エントロピー増大則

エントロピー増大則あるいは熱力学第2法則は、一般に次のように定式化される<sup>(80)(105)</sup>。

$$\int_{\mathcal{V}} \rho \dot{\gamma}^{[i]} dv = \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}} \rho \eta dv - \left( - \oint_{\mathcal{S}} \frac{\mathbf{q}}{\vartheta} \cdot \mathbf{n} da + \int_{\mathcal{V}} \frac{\rho r}{\vartheta} dv \right) \geq 0 \dots\dots\dots (3.42)$$

ここで、 $\dot{\gamma}^{[i]}$ は単位時間当たりの内部エントロピー生成密度、 $\eta$ はエントロピー密度である。また、 $\mathbf{q}/\vartheta$ および $r/\vartheta$ はそれぞれ局所エントロピー流束および体積供給エントロピー密度を表す。式(3.42)の両辺に $\vartheta$ を乗じて局所化すると、次式で表されるエントロピー不等式が得られる。

$$\rho \vartheta \dot{\gamma}^{[i]} = \rho \vartheta \dot{\eta} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{q} + \operatorname{div} \mathbf{q} - \rho r \geq 0 \dots\dots\dots (3.43)$$

ここで、

$$\mathbf{g} \equiv \frac{\nabla \vartheta}{\vartheta} \dots\dots\dots (3.44)$$

は温度こう配である。

## 3.3 Clausius-Duhem の不等式

式(3.41)のエネルギー保存則を用いてエントロピー不等式(3.43)における外部供給熱項( $\operatorname{div} \mathbf{q} - \rho r$ )を消去すれば、次式で表される Clausius-Duhem の不等式が得られる。

$$\Phi = \rho \vartheta \dot{\eta} - \rho \dot{\varepsilon} + \mathbf{T} \cdot \mathbf{D}^e + \sum_{\alpha} \hat{\tau}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \xi^{(\alpha)} \cdot \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{q} \geq 0 \dots\dots\dots (3.45)$$

ここで、 $\Phi \equiv \rho \vartheta \dot{\gamma}^{[i]}$ は散逸関数である<sup>(105)</sup>。式(3.45)の両辺に $J$ を乗じた後に各量を第2中間配置に pull-back すれば次式を得る。

$$\tilde{\Phi} = \vartheta \dot{H} - \dot{U} + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^e + \sum_{\alpha} \tilde{\tau}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \tilde{\xi}^{(\alpha)} \cdot \nabla_{(m)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} - \tilde{\mathbf{g}}_{(m)} \cdot \mathbf{q}_{(m)} \geq 0 \dots\dots\dots (3.46)$$

ここで、 $H$ および $U$ はそれぞれ $H \equiv \rho_{(1)} \eta$ および $U \equiv \rho_{(1)} \varepsilon$ である。また、熱流束の配置変換則は、温度こう配がナブラの変換則に従って $\mathbf{g} = \mathbf{R}^* \mathbf{g}_{(m)}$ と表されることから $\mathbf{q} = \mathbf{R}^* \mathbf{q}_{(m)}$ となる。

続いて、3.1節で述べた全自由エネルギーの保存部分 $\Psi^{[c]}$ が一般的な Helmholtz の自由エネルギーと同様に

$$\Psi^{[c]} = U - \vartheta H \dots\dots\dots (3.47)$$

と記述できると考える．そして，式(3.47)を用いて式(3.46)に Legendre 変換を施せば次式を得る．

$$\tilde{\Phi} = -\left(\dot{\Psi}^{[c]} + H\dot{\vartheta}\right) + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^e + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p + \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \mathbf{Z}_{(m)} - \tilde{\mathbf{g}}_{(m)} \cdot \mathbf{q}_{(m)} \geq 0 \dots\dots\dots (3.48)$$

ただし，式(3.11)<sub>2</sub>，式(3.24)および  $\tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \mathbf{Z}_{(m)} = \sum_{\alpha} \tilde{\boldsymbol{\xi}}_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \nabla_{(m)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}$  の関係を用いて右辺第3項および第4項をテンソル量にて記述している．式(3.46)と式(3.48)を比較すると，温度  $\vartheta$  とエントロピー  $H$  の従属-独立関係が逆転し，式(3.48)では容易に制御可能な量である温度が独立変数となっていることがわかる．

一般に弾塑性変形を記述する場合には，応力を独立変数，ひずみを従属変数にする方が望ましい<sup>(75)</sup>．そこで，式(3.48)における応力とひずみの従属-独立関係を逆転させるために次式で定義する Gibbs 関数を導入する．

$$G \equiv \Psi^{[c]} - \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{E}_{(m)}^e - \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}^{[c]} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p \dots\dots\dots (3.49)$$

ここで， $\Psi^{[c]}$  は熱力学的状態量であり，一般に  $G$  も熱力学的状態量と考えるため<sup>(106)</sup>， $G$  に寄与する仕事には保存仕事のみを考慮している．式(3.49)を用いて式(3.48)の Legendre 変換を再度行えば，

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi} = & -\left(\dot{G} + H\dot{\vartheta} + \mathbf{E}_{(m)}^e \cdot \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)} + \mathbf{D}_{(m)}^p \cdot \dot{\tilde{\mathbf{M}}}_{(m)}^{[c]}\right) \\ & + \mathbf{D}_{(m)}^p \cdot \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} + \mathbf{Z}_{(m)} \cdot \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} - \mathbf{q}_{(m)} \cdot \tilde{\mathbf{g}}_{(m)} - \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p \cdot \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}^{[c]} \geq 0 \dots\dots\dots (3.50) \end{aligned}$$

を得る．ここで，式(3.50)において  $\tilde{\mathbf{T}}_{(m)}$  と  $\mathbf{E}_{(m)}^e$ ， $\tilde{\mathbf{M}}_{(m)}^{[c]}$  と  $\mathbf{D}_{(m)}^p$  の従属-独立関係を変換したため，残りの項においても力学量を引数，幾何学量を従属変数として考える．

### 3.4 保存部分の熱力学的制限

式(3.50)より，Gibbs 関数の引数は次のように選択できる．

$$G = G\left(\vartheta, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{N}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{g}}_{(m)}; \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}^{[c]}\right) \dots\dots\dots (3.51)$$

したがって， $G$  の物質時間微分は鎖則により次式のように書ける．

$$\dot{G} = \frac{\partial G}{\partial \vartheta} \dot{\vartheta} + \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{N}}_{(m)}} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{N}}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{g}}_{(m)}} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{g}}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}^{[c]}} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{M}}}_{(m)}^{[c]} \dots\dots\dots (3.52)$$

式(3.52)を式(3.50)に代入すると

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi} = & -\left(H + \frac{\partial G}{\partial \vartheta}\right) \dot{\vartheta} - \left(\mathbf{E}_{(m)}^e + \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}}\right) \cdot \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)} - \left(\mathbf{D}_{(m)}^p + \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}^{[c]}}\right) \cdot \dot{\tilde{\mathbf{M}}}_{(m)}^{[c]} + \mathbf{D}_{(m)}^p \cdot \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} + \mathbf{Z}_{(m)} \cdot \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \\ & - \mathbf{q}_{(m)} \cdot \tilde{\mathbf{g}}_{(m)} - \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p \cdot \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}^{[c]} - \left(\frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{N}}_{(m)}} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{N}}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{g}}_{(m)}} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{g}}}_{(m)}\right) \geq 0 \dots\dots\dots (3.53) \end{aligned}$$

となる．式(3.51)を考慮すれば式(3.53)右辺最後尾の括弧内の各項は各速度に関してそれぞれ線形であるため，不等式(3.53)が常に成立するためには

$$\frac{\partial G}{\partial \tilde{T}_{(m)}} = 0, \quad \frac{\partial G}{\partial \tilde{N}_{(m)}} = 0, \quad \frac{\partial G}{\partial \tilde{g}_{(m)}} = 0 \dots\dots\dots (3.54)$$

であればよい．したがって， $G$ の引数は次のように限定される．

$$G = G(\vartheta, \tilde{T}_{(m)}; \tilde{M}_{(m)}^{[c]}) \dots\dots\dots (3.55)$$

また，式(3.53)右辺第1～3項の各速度 $\dot{\vartheta}$ ， $\dot{\tilde{T}}_{(m)}$ および $\dot{\tilde{M}}_{(m)}^{[c]}$ は任意の値をとることができるため，式(3.53)が常に成り立つためには各係数が零であればよい．したがって，保存部分に対する熱力学的関係式が次のように得られる．

$$H = -\frac{\partial G}{\partial \vartheta}, \quad E_{(m)}^e = -\frac{\partial G}{\partial \tilde{T}_{(m)}}, \quad D_{(m)}^p = -\frac{\partial G}{\partial \tilde{M}_{(m)}^{[c]}} \dots\dots\dots (3.56)$$

一方，式(3.53)右辺第4～7項の各熱力学的力 $(\tilde{T}_{(m)}, \tilde{N}_{(m)}, \tilde{g}_{(m)}, \tilde{M}_{(m)}^{[c]})$ は各速度 $(D_{(m)}^p, Z_{(m)}, q_{(m)}, \dot{D}_{(m)}^p)$ に依存すると考えられるため，これらの項にはこの段階で制限を課すことはできない．したがって，散逸関数は式(3.54)および式(3.56)を考慮して次のように書き直される．

$$\tilde{\Phi} = D_{(m)}^p \cdot \tilde{T}_{(m)} + Z_{(m)} \cdot \tilde{N}_{(m)} - q_{(m)} \cdot \tilde{g}_{(m)} + \dot{D}_{(m)}^p \cdot \tilde{M}_{(m)}^{[d]} \geq 0 \dots\dots\dots (3.57)$$

ただし，式(3.57)右辺最後尾項には式(3.12)の関係を用いている．また，式(3.55)および式(3.56)より，保存仕事をなす各共役量の構成式の一般形は次式で与えられる．

$$\left. \begin{aligned} H &= H(\vartheta, \tilde{T}_{(m)}; \tilde{M}_{(m)}^{[c]}) = -\frac{\partial G}{\partial \vartheta}(\vartheta, \tilde{T}_{(m)}; \tilde{M}_{(m)}^{[c]}) \\ E_{(m)}^e &= E_{(m)}^e(\vartheta, \tilde{T}_{(m)}; \tilde{M}_{(m)}^{[c]}) = -\frac{\partial G}{\partial \tilde{T}_{(m)}}(\vartheta, \tilde{T}_{(m)}; \tilde{M}_{(m)}^{[c]}) \\ D_{(m)}^p &= D_{(m)}^p(\vartheta, \tilde{T}_{(m)}; \tilde{M}_{(m)}^{[c]}) = -\frac{\partial G}{\partial \tilde{M}_{(m)}^{[c]}}(\vartheta, \tilde{T}_{(m)}; \tilde{M}_{(m)}^{[c]}) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.58)$$

ただし，弾性構成式(3.58)<sub>2</sub>に対して，本研究では4.1節で示すように線形構成式を想定する．その場合には，弾性構成式の一般形を式(3.5)<sub>2</sub>および式(3.6)より

$$\tilde{T}_{(m)} = \frac{\partial \psi^{[c]}}{\partial E_{(m)}^e}(\vartheta, E_{(m)}^e; D_{(m)}^p) \dots\dots\dots (3.59)$$

と表すこともできる．式(3.59)は弾性保存仕事をなす構成関係の別表現であり，4.1節では式(3.59)に基づいて線形の弾性構成式を具体化する．なお，結晶塑性論では2章で述べたように $D_{(m)}^p$ が運動学的に定まるため，式(3.58)<sub>3</sub>は不要となる．

### 3.5 散逸部分の熱力学的制限

散逸関数は全自由エネルギー変化率の散逸部分に等しいため，

$$\tilde{\Phi} = \dot{\tilde{\Psi}}^{[d]} \dots\dots\dots (3.60)$$



と書ける．したがって，式(3.6)の引数を考慮すれば式(3.57)で表される散逸関数の引数は

$$\tilde{\Phi} = \tilde{\Phi}(\mathbf{D}_{(m)}^p, \mathbf{Z}_{(m)}, \mathbf{q}_{(m)}; \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p) \dots \dots \dots (3.61)$$

となる．また，式(3.57)の不等式は任意の現象に対して力学的な項と熱力学的な項に分解でき，

$$\tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p + \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \mathbf{Z}_{(m)} + \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}^{[d]} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p \geq 0, \quad -\tilde{\mathbf{g}}_{(m)} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{p}}}_{(m)} \geq 0 \dots \dots \dots (3.62)$$

と表すことができる<sup>(105)</sup>．すなわち，式(3.62)<sub>1</sub>を満たすように $\tilde{\mathbf{T}}_{(m)}$ ， $\tilde{\mathbf{N}}_{(m)}$ および $\tilde{\mathbf{M}}_{(m)}^{[d]}$ の関数形を決定して変形を記述せねばならない．一方，熱伝導に関する式(3.62)<sub>2</sub>からは一般的なFourierの法則が導かれるが，本研究では一定温度下の変形を対象として熱伝導は考えない．そこで， $\tilde{\mathbf{g}}_{(m)} = \mathbf{0}$ のもとで式(3.57)を式(2.97)および式(2.134)を用いて

$$\tilde{\Phi} = \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p + \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \mathbf{Z}_{(m)} + \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}^{[d]} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p = \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{E}}}_{(m)}^p + \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \dot{\tilde{\boldsymbol{\alpha}}}_{(m)} + \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}^{[d]} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p \geq 0 \dots \dots \dots (3.63)$$

と書き，式(3.60)の関係を用いて単位質量当たりの散逸エネルギーを全微分形で表せば次式のように書ける．

$$d\tilde{\Psi}^{[d]} = \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot d\tilde{\mathbf{E}}_{(m)}^p + \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot d\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)} + \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}^{[d]} \cdot d\mathbf{D}_{(m)}^p \geq 0 \dots \dots \dots (3.64)$$

ここで，式(3.5)および式(3.64)右辺各項の係数に注目すれば，各熱力学的力と散逸エネルギー $\tilde{\Psi}^{[d]}$ にそれぞれ次の関係があることがわかる．

$$\tilde{\mathbf{T}}_{(m)} = \frac{\partial \tilde{\Psi}^{[d]}}{\partial \tilde{\mathbf{E}}_{(m)}^p}, \quad \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} = \frac{\partial \tilde{\Psi}^{[d]}}{\partial \tilde{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)}}, \quad \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}^{[d]} = \frac{\partial \tilde{\Psi}^{[d]}}{\partial \mathbf{D}_{(m)}^p} \dots \dots \dots (3.65)$$

また，それらの引数は式(3.6)より，それぞれ次のように書ける．

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} &= \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}(\tilde{\mathbf{E}}_{(m)}^p, \tilde{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)}; \mathbf{D}_{(m)}^p) \\ \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} &= \tilde{\mathbf{N}}_{(m)}(\tilde{\mathbf{E}}_{(m)}^p, \tilde{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)}; \mathbf{D}_{(m)}^p) \\ \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}^{[d]} &= \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}^{[d]}(\tilde{\mathbf{E}}_{(m)}^p, \tilde{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)}; \mathbf{D}_{(m)}^p) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (3.66)$$

一方，式(3.57)の両辺を $J$ で除し， $\hat{\mathbf{T}}_{(m)}$ および $\mathbf{N}_{(m)}$ を各すべり系に射影すると

$$\Phi = \rho \dot{\tilde{\Psi}}^{[d]} = \sum_{\alpha} \hat{\gamma}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \boldsymbol{\xi}_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \nabla_{(m)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \mathbf{M}_{(m)}^{[d]} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p \geq 0 \dots \dots \dots (3.67)$$

と書ける．ここで，式(3.67)最右辺第2項は次のように変形できる．

$$\sum_{\alpha} \boldsymbol{\xi}_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \nabla_{(m)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} (\bar{\mathbf{F}}^{-1} \boldsymbol{\xi}_{(m)}^{(\alpha)}) \cdot \nabla_{(l)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \boldsymbol{\xi}_{(l)}^{(\alpha)} \cdot (\nabla_{(l)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}) \dots \dots \dots (3.68)$$

ただし，初期配置 $\beta_{(l)}$ における高次応力を $\boldsymbol{\xi}_{(l)}^{(\alpha)} \equiv \bar{\mathbf{F}}^{-1} \boldsymbol{\xi}_{(m)}^{(\alpha)}$ と定義している．また，式(3.67)最右辺第3項は，塑性変形速度の物質時間微分が微小弾性変形の仮定より

$$\dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p \approx \sum_{\alpha} \mathbf{P}_{S(m)}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.69)$$

と書けるため、次のように変形できる.

$$\mathbf{M}_{(m)}^{[d]} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p = \sum_{\alpha} \hat{\gamma}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.70)$$

ただし,  $\mathbf{M}_{(m)}^{[d]}$  の  $\alpha$  すべり系への射影を

$$\hat{\gamma}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{M}_{(m)}^{[d]} \cdot \mathbf{P}_{S(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.71)$$

と定義する. したがって, 式 (3.67) は

$$\Phi = \sum_{\alpha} \left[ \hat{\tau}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \xi_{(l)}^{(\alpha)} \cdot (\nabla_{(l)} \gamma^{(\alpha)})^{\bullet} + \hat{\gamma}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right] \geq 0 \dots \dots \dots (3.72)$$

と書くことができ, 式 (3.60) より単位質量当たりの散逸エネルギーの全微分形は次のように表される.

$$d\bar{\psi}^{[d]} = \sum_{\alpha} \frac{\hat{\tau}^{(\alpha)}}{\rho} d\gamma^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \frac{\xi_{(l)}^{(\alpha)}}{\rho} \cdot d(\nabla_{(l)} \gamma^{(\alpha)}) + \sum_{\alpha} \frac{\hat{\gamma}^{(\alpha)}}{\rho} d\dot{\gamma}^{(\alpha)} \geq 0 \dots \dots \dots (3.73)$$

したがって, 式 (3.73) 右辺の各力は

$$\hat{\tau}^{(\alpha)} = \rho \frac{\partial \bar{\psi}^{[d]}}{\partial \gamma^{(\alpha)}}, \quad \xi_{(l)}^{(\alpha)} = \rho \frac{\partial \bar{\psi}^{[d]}}{\partial (\nabla_{(l)} \gamma^{(\alpha)})}, \quad \hat{\gamma}^{(\alpha)} = \rho \frac{\partial \bar{\psi}^{[d]}}{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}} \dots \dots \dots (3.74)$$

と表され, それらの引数はそれぞれ次のように書ける.

$$\left. \begin{aligned} \hat{\tau}^{(\alpha)} &= \hat{\tau}^{(\alpha)} \left( \gamma^{(\alpha)}, \nabla_{(l)} \gamma^{(\alpha)}; \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right) \\ \xi_{(l)}^{(\alpha)} &= \xi_{(l)}^{(\alpha)} \left( \gamma^{(\alpha)}, \nabla_{(l)} \gamma^{(\alpha)}; \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right) \\ \hat{\gamma}^{(\alpha)} &= \hat{\gamma}^{(\alpha)} \left( \gamma^{(\alpha)}, \nabla_{(l)} \gamma^{(\alpha)}; \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (3.75)$$

式 (2.153) および式 (2.156) より  $\gamma^{(\alpha)}$  は SS 転位密度  $\rho_S^{(\alpha)}$  と関連し, また式 (2.131) および式 (2.137) より  $\nabla_{(l)} \gamma^{(\alpha)}$  は GN 転位密度  $\rho_{G(s)}^{(\alpha)}$ ,  $\rho_{G(e)}^{(\alpha)}$  と関連する量であるため, 式 (3.75) の各力は各転位密度を引数にもつとみなせる. したがって, 式 (3.75)<sub>1</sub> より各転位密度が材料の加工硬化に寄与することがわかり, 4.3 節で述べるような各転位密度の硬化則への導入は熱力学的に正しいといえる. また, 村上ら<sup>(102)</sup> の検討によれば,  $\hat{\gamma}^{(\alpha)}$  は  $\hat{\tau}^{(\alpha)}$  の時間に関する高次量となり, 式 (3.72) 右辺第 1 項および第 3 項には次の関係が成立する.

$$\sum_{\alpha} \left[ \hat{\tau}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \hat{\gamma}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right] \geq 0 \dots \dots \dots (3.76)$$

したがって, 式 (3.72) が常に成立するためには式 (3.72) 右辺第 2 項が単独で常に正となればよい. しかしながら, 式 (3.75)<sub>2</sub> より  $\xi_{(l)}^{(\alpha)}$  は引数に  $\nabla_{(l)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}$  を持たないため,  $\sum_{\alpha} \xi_{(l)}^{(\alpha)} \cdot \nabla_{(l)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \geq 0$  が常に成り立つ保証はない. この問題を解決するためには, 該当する  $\xi_{(l)}^{(\alpha)}$  の項に式 (3.76) を導出する過程と同様の手法を適用すればよいと考えられる. すなわち, 式 (3.2) で定義した全自由エネルギーの引数に  $\nabla_{(l)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}$  に相当する量を内部変数として導入し,  $\xi_{(l)}^{(\alpha)}$  の時間に関する高次量を考慮すればよい. しかしながら, 内部変数にはベクトル量を選択できないため<sup>(99)(107)</sup>,  $\nabla_{(l)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}$  の代わりに  $\mathbf{Z}_{(m)}$  が適切な内部変数の選択と考えられる. ただし, その詳細な導出は本研究では行わず今後の課題とする.

## 4章

# 構成式と硬化則

本章では、転位-結晶塑性論における速度形弾・粘塑性構成式、高次応力の速度形構成式および硬化則を導出する。まず、3.4節で示した応力と弾性ひずみの構成関係に基づいて弾性構成式を導出し、結晶塑性論に適した形で速度形弾塑性構成式へ拡張する。続いて、3.5節で示した高次応力の関数形に基づいてその構成式を導出する。その際、構成式に含まれる未定乗数を転位論の立場から決定する。次に、結晶塑性論および転位-結晶塑性論における硬化則の一般論を示し、それらを高次理論に適する形に修正する。また、粘塑性形の硬化則を考慮することで速度形弾・粘塑性構成式を導く。最後に、硬化則に考慮する LPSO 相の活動すべり系の選択について述べる。

### 4.1 弾塑性構成式

本節では、3.4節で示した応力と弾性ひずみの構成関係を用いて弾性構成式を導出する。続いて、弾塑性変形を表現するために弾性構成式を速度形に拡張し、客観速度を用いて弾塑性構成式を記述する。

#### 4.1.1 速度形弾性構成式

弾性構成式は式 (3.58)<sub>2</sub> を用いて具体化できる。ただし、金属材料の弾性変形において応力と弾性ひずみは一般に線形関係を有するため、線形弾性構成式を想定する場合には式 (3.58)<sub>2</sub> と式 (3.59) のどちらの関係式を用いても同一の構成式が得られる。そこで本研究では、全自由エネルギーの保存部分  $\Psi^{[c]}$  を具体化し、式 (3.59) を用いて線形弾性構成式を導出する。

まず、弾性変形の温度依存性を無視し、等温過程における全自由エネルギーの保存部分を次のように表す。

$$\Psi^{[c]} = \Psi^{[c]}(\mathbf{E}_{(m)}^e; \mathbf{D}_{(m)}^p) = \Psi^e(\mathbf{E}_{(m)}^e) + \Psi^i(\mathbf{D}_{(m)}^p) \dots \dots \dots (4.1)$$

また、応力の2次以上の項が作用する弾性ひずみ場は十分小さいものと仮定し、応力が零のとき弾性ひずみも零となる処女材を考えれば、弾性ひずみエネルギー関数  $\Psi^e$  は次のように書ける<sup>(80)</sup>。

$$\Psi^e = \frac{1}{2} \mathbf{E}_{(m)}^e \cdot (\mathbf{C}_{(m)}^e : \mathbf{E}_{(m)}) \dots \dots \dots (4.2)$$

ここで、 $\mathbf{C}_{(m)}^e$  は4階の異方性弾性係数テンソルである [補足 B.1 参照]. したがって, 式 (3.59) より次式の弾性構成式が得られる.

$$\tilde{\mathbf{T}}_{(m)} = \frac{\partial \Psi^e}{\partial \mathbf{E}_{(m)}^e} = \mathbf{C}_{(m)}^e : \mathbf{E}_{(m)}^e \dots \dots \dots (4.3)$$

ただし,  $\mathbf{C}_{(m)}^e$  は応力および弾性ひずみの対称性から次式の性質をもつ<sup>(108)</sup>.

$$C_{(m)\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\delta}\hat{\varepsilon}}^e = C_{(m)\hat{\beta}\hat{\alpha}\hat{\delta}\hat{\varepsilon}}^e = C_{(m)\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\varepsilon}\hat{\delta}}^e = C_{(m)\hat{\delta}\hat{\varepsilon}\hat{\alpha}\hat{\beta}}^e \dots \dots \dots (4.4)$$

また, 微小弾性変形を仮定すれば  $J \approx 1$  であり, 式 (4.3) における  $\tilde{\mathbf{T}}_{(m)}$  は

$$\mathbf{T}_{(m)} = \mathbf{C}_{(m)}^e : \mathbf{E}_{(m)}^e \dots \dots \dots (4.5)$$

と  $\mathbf{T}_{(m)}$  に置き換えることができる. さらに, 式 (4.5) に物質時間微分を施せば, 第2中間配置  $\beta_{(m)}$  における速度形弾性構成式が次のように得られる.

$$\dot{\mathbf{T}}_{(m)} = \mathbf{C}_{(m)}^e : \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e = \mathbf{C}_{(m)}^e : \mathbf{D}_{(m)}^e \dots \dots \dots (4.6)$$

ここで, 式 (4.6) の最後の等式には式 (2.94)<sub>2</sub> を用いている. 式 (4.6) を現配置  $\beta_{(c)}$  に push-forward すれば, 客観速度で記述された次式の速度形弾性構成式が得られる.

$$\overset{\vee}{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^e : \mathbf{D}^e \dots \dots \dots (4.7)$$

ただし,  $\overset{\vee}{\mathbf{T}}$  は式 (2.19) に示す Mandel-Kratovichil 速度<sup>(77)</sup>

$$\overset{\vee}{\mathbf{T}} = \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{W}^* \mathbf{T} + \mathbf{T} \mathbf{W}^* \dots \dots \dots (4.8)$$

であり, 対称テンソルとなる. また, 異方性弾性係数は  $C_{ijkl}^e = R_{i\hat{\alpha}}^* R_{j\hat{\beta}}^* R_{k\hat{\delta}}^* R_{l\hat{\varepsilon}}^* C_{(m)\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\delta}\hat{\varepsilon}}^e$  のように配置変換される. なお,  $\mathbf{C}^e$  も次の性質を有する<sup>(108)</sup>.

$$C_{ijkl}^e = C_{jikl}^e = C_{ijlk}^e = C_{klij}^e \dots \dots \dots (4.9)$$

#### 4.1.2 結晶塑性論における速度形弾塑性構成式

式 (4.7) における弾性変形速度  $\mathbf{D}^e$  を式 (2.48) を用いて全変形速度  $\mathbf{D}$  およびその塑性部分  $\mathbf{D}^p$  の差で表し, 式 (2.111)<sub>1</sub> を用いると結晶塑性論における速度形弾塑性構成式が次のように得られる.

$$\overset{\vee}{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^e : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^p) = \mathbf{C}^e : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.10)$$

結晶塑性論では古典的連続体理論で用いるような塑性構成式<sup>(53)</sup> は不要であり, すべり速度  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  に対する硬化則のみが要請される. その硬化則の詳細については後述の 4.3 節にて述べる. なお, 本節で導出した弾塑性構成式は従来の結晶塑性論および転位-結晶塑性論におけるものと同じである.

## 4.2 高次応力の構成式

本節では、3.5節で導出した高次応力の関数形からその構成式を具体化する。その際、簡単化のために高次応力の塑性ひずみおよび塑性変形速度の依存性を無視し、GN転位密度に対して線形な構成式を与える。続いて、構成式に含まれる未定乗数を材料科学的観点から決定する。

### 4.2.1 結晶塑性論における速度形構成式

高次応力の関数形は式(3.66)<sub>2</sub>または式(3.75)<sub>2</sub>により与えられるが、本項ではまずすべり系間の相互作用を含む構成式の一般論を示すために、マクロなテンソル量である $\tilde{\mathbf{N}}_{(m)}$ に対する式(3.66)<sub>2</sub>に基づいて高次応力の構成式を具体化する。まず、簡単化のために高次応力の塑性ひずみ $\bar{\mathbf{E}}_{(m)}^p$ および塑性変形速度 $\mathbf{D}_{(m)}^p$ の依存性を無視し、GN転位密度 $\bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)}$ に対して線形な構成式を想定すれば次式を得る。

$$\tilde{\mathbf{N}}_{(m)} = \lambda \bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)} \dots \dots \dots (4.11)$$

ここで、 $\lambda$ はスカラの未定乗数である。また、式(3.18)より $\boldsymbol{\xi}_{(m)}^{(\alpha)}$ は $\tilde{\mathbf{N}}_{(m)}$ の $\alpha$ すべり系への射影として

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi}_{(m)}^{(\alpha)} &= J^{-1} \left[ \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \left( \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \right] \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} - J^{-1} \left[ \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \left( \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \right] \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \\ &= J^{-1} \lambda \left[ \bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)} \cdot \left( \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \right] \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} - J^{-1} \lambda \left[ \bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)} \cdot \left( \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \right] \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.12) \end{aligned}$$

と表され、式(4.12)に式(2.146)を代入すれば次式が得られる。

$$\boldsymbol{\xi}_{(m)}^{(\alpha)} = J^{-1} \lambda \sum_{\beta} \tilde{b}^{(\beta)} B_{ss}^{(\beta\alpha)} \left[ \left( \rho_{G(s)}^{(\beta)} B_{ss}^{(\beta\alpha)} + \rho_{G(e)}^{(\beta)} B_{ts}^{(\beta\alpha)} \right) \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} - \left( \rho_{G(s)}^{(\beta)} B_{st}^{(\beta\alpha)} + \rho_{G(e)}^{(\beta)} B_{tt}^{(\beta\alpha)} \right) \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \right] \dots \dots \dots (4.13)$$

ここで、

$$B_{ss}^{(\beta\alpha)} \equiv \mathbf{s}_{(m)}^{(\beta)} \cdot \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)}, \quad B_{ts}^{(\beta\alpha)} \equiv \mathbf{t}_{(m)}^{(\beta)} \cdot \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)}, \quad B_{st}^{(\beta\alpha)} \equiv \mathbf{s}_{(m)}^{(\beta)} \cdot \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)}, \quad B_{tt}^{(\beta\alpha)} \equiv \mathbf{t}_{(m)}^{(\beta)} \cdot \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.14)$$

は高次応力の幾何学的なすべり系間相互作用を表す係数である。式(4.13)より、 $\boldsymbol{\xi}_{(m)}^{(\alpha)}$ はGN転位密度の1次の関数となることがわかる。ここで、GN転位は結晶粒界などの変形が極めて不均一な領域に存在するため、 $\boldsymbol{\xi}_{(m)}^{(\alpha)}$ に対するすべり系間相互作用は結晶粒スケール程度の大きさで長範囲的に発生すると考えられる。一方で、加工硬化の主因となる転位の切り合い等による潜在的相互作用は、林立転位間の距離程度の大きさで短範囲的に生じる。したがって、すべり系間の相互作用は長範囲オーダーおよび短範囲オーダーで作用するものの2種類に分類することができるが、本研究では理論の簡単化のために相互作用には短範囲オーダーのもののみ考慮することとする。そこで、 $\boldsymbol{\xi}_{(m)}^{(\alpha)}$ のすべり系間相互作用を無視し、式(4.13)において $\alpha = \beta$ の場合のみを考えると構成式は

$$\boldsymbol{\xi}_{(m)}^{(\alpha)} = J^{-1} \lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left( \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} - \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (4.15)$$

と書ける。ここで、式(4.15)および図2.9より、 $\boldsymbol{\xi}_{(m)}^{(\alpha)}$ の各成分はらせん転位および刃状転位にそれぞれ垂直に作用することがわかる。そこで、Gurtin<sup>(104)</sup>は古典的な転位論におけるPeach-Koehler力<sup>(87)</sup>と関連付け、式(4.15)の形で定義される高次応力を連続分布Peach-Koehler力と解釈している。

式(4.15)に微小弾性変形の仮定を適用すれば、 $J^{-1} \approx 1$ より

$$\xi_{(m)}^{(\alpha)} = \lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left( \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \boldsymbol{t}_{(m)}^{(\alpha)} - \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \boldsymbol{s}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (4.16)$$

となり、式(4.16)の両辺の物質時間微分をとった後に式(3.21)、式(2.102)および式(2.130)を用いて現配置 $\beta_{(c)}$ にpush-forwardすれば次式の速度形構成式を得る[補足B.2参照].

$$\check{\xi}^{(\alpha)} = \lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left( \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \boldsymbol{t}^{(\alpha)} - \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \boldsymbol{s}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (4.17)$$

ただし、 $\check{\xi}^{(\alpha)}$ は式(2.18)に示すように

$$\check{\xi}^{(\alpha)} = \dot{\xi}^{(\alpha)} - W^* \xi^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.18)$$

と定義される客観性を有する速度である。また、式(4.17)の導出では結晶基底 $\boldsymbol{s}^{(\alpha)}$ および $\boldsymbol{t}^{(\alpha)}$ の発展を次式のように与えている<sup>(109)(110)</sup>.

$$\dot{\boldsymbol{s}}^{(\alpha)} = W^* \boldsymbol{s}^{(\alpha)}, \quad \dot{\boldsymbol{t}}^{(\alpha)} = W^* \boldsymbol{t}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.19)$$

なお、以降ではすべり面法線ベクトル $\boldsymbol{m}^{(\alpha)}$ の発展も式(4.19)と同様に次式で与えるものとする<sup>(109)(110)</sup>.

$$\dot{\boldsymbol{m}}^{(\alpha)} = W^* \boldsymbol{m}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.20)$$

さらに、式(4.17)に式(2.131)を代入すれば

$$\check{\xi}^{(\alpha)} = \hat{\boldsymbol{S}}^{(\alpha)} \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.21)$$

と書くことができる。ここで、 $\hat{\boldsymbol{S}}^{(\alpha)}$ は

$$\hat{\boldsymbol{S}}^{(\alpha)} \equiv \lambda \left( \boldsymbol{s}^{(\alpha)} \otimes \boldsymbol{s}^{(\alpha)} + \boldsymbol{t}^{(\alpha)} \otimes \boldsymbol{t}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (4.22)$$

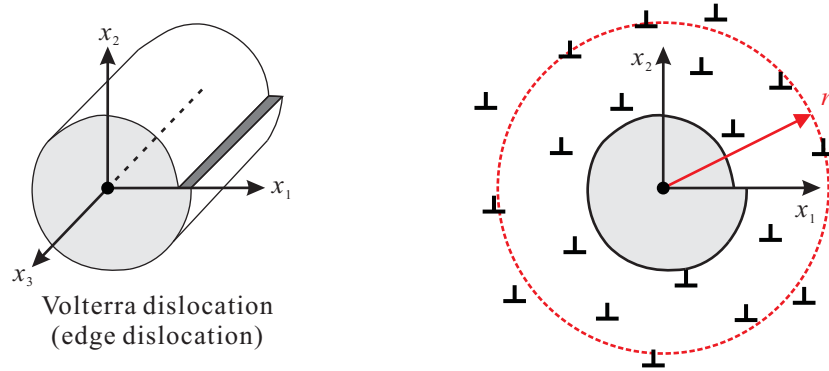
と定義する対称テンソルである。

#### 4.2.2 未定乗数 $\lambda$ の決定

$\xi_{(m)}^{(\alpha)}$ の構成式の具体化には、式(4.17)における未定乗数 $\lambda$ を決定せねばならない。Gurtin<sup>(104)</sup>はGN転位が保存仕事をなすという仮定のもと、高次応力に式(4.15)と同形式の構成式を考えており、その係数 $\lambda$ に次の定義を行っている。

$$\lambda = g^{(\alpha)} L_1^2 \dots \dots \dots (4.23)$$

ここで、 $g^{(\alpha)}$ は後述する流れ応力、 $L_1$ は材料固有の特性長である。しかしながら、式(4.23)の定義では特性長 $L_1$ の物理的な解釈が不明である。そこで本研究では、古典的な転位論に基づいた検討によって $\lambda$ を決定する。

Fig. 4.1 Definition of intrinsic length scale  $r$ .

Evers ら<sup>(111)</sup>, Bayley ら<sup>(112)</sup> は背応力  $\tau_b^{(\alpha)}$  は GN 転位密度の空間こう配によって形成されるという仮定のもと、転位線近傍の線形等方弾性論<sup>(71)(87)</sup>に基づいて  $\tau_b^{(\alpha)}$  を次のように定式化している [補足 B.3 参照].

$$\tau_b^{(\alpha)} = -\frac{\mu \tilde{b}^{(\alpha)} r^2}{4} \left[ \left( \nabla_{(1)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) - \frac{1}{2(1-\nu)} \left( \nabla_{(1)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \right] \dots \dots \dots (4.24)$$

ここで、 $\mu$  は等方弾性体における横弾性係数、 $\nu$  はポアソン比、 $\nabla_{(1)}$  は初期配置における微分演算子である。また、 $r$  は図 4.1 に示すように、物質点に作用する背応力に考慮する GN 転位群の物質点からの距離を表す特性長である。したがって、物質点は距離  $r$  以上離れた位置に存在する GN 転位からの影響を受けない。すなわち、 $r$  が小さなおときは、物質点には近傍に存在する GN 転位に起因した背応力が作用する。一方、 $r$  が大きい場合、物質点に作用する背応力にはより遠方に存在する GN 転位の寄与も考慮される。また、式 (4.24) の導出において、物質点から半径  $r$  内の領域では GN 転位密度は線形に分布すると仮定している。なお、特性長  $r$  は、Al 多結晶薄片に対するマイクロ曲げ試験および数値解析により  $r = 3 \sim 4 \mu\text{m}$ <sup>(113)</sup>、Cu 単結晶薄片に対するマイクロ曲げ試験および数値解析により  $r = 3 \sim 4 \mu\text{m}$ <sup>(114)</sup> および Ni 多結晶薄片に対する引張試験および数値解析により  $r \sim 5 \mu\text{m}$ <sup>(115)</sup> とそれぞれの材料で見積もられている。

ここで、本研究で構築する高次理論において、背応力  $\tau_b^{(\alpha)}$  は高次応力  $\xi^{(\alpha)}$  の発散との釣合い (式 (3.30)<sub>3</sub>) を考えることで得られる。そこで、前項で導出した  $\xi^{(\alpha)}$  の構成式から導かれる  $\tau_b^{(\alpha)}$  と Evers ら<sup>(111)</sup> が提案した  $\tau_b^{(\alpha)}$  の定義式 (4.24) を比較することで未定乗数  $\lambda$  を決定する。

まず式 (4.16) を現配置  $\beta_{(e)}$  に push-forward すれば

$$\xi^{(\alpha)} = \lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left( \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{t}^{(\alpha)} - \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (4.25)$$

となり、式 (3.30)<sub>3</sub> を適用すれば本理論体系における背応力が次のように導かれる。

$$\begin{aligned} \tau_b^{(\alpha)} &= -\text{div } \xi^{(\alpha)} = -\lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left( \nabla \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)} - \nabla \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)} + \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \text{div } \mathbf{t}^{(\alpha)} - \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \text{div } \mathbf{s}^{(\alpha)} \right) \\ &= -\lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left[ \left( \nabla_{(1)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} - \nabla_{(1)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right) + \left( \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \text{div } \mathbf{t}^{(\alpha)} - \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \text{div } \mathbf{s}^{(\alpha)} \right) \right] \dots \dots \dots (4.26) \end{aligned}$$



したがって、式(4.24)と式(4.26)を比較すれば、結晶基底およびその発散項の有無などの差異はみられるものの数値係数を大まかに

$$\lambda \sim \frac{\mu r^2}{4} \dots\dots\dots (4.27)$$

と評価することができる。そこで、本研究では式(4.27)により未定乗数 $\lambda$ を与え、 $\xi^{(\alpha)}$ の速度形構成式を式(4.17)、式(4.21)および式(4.22)より

$$\begin{aligned} \check{\xi}^{(\alpha)} &= \frac{\mu \tilde{b}^{(\alpha)} r^2}{4} \left( \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{t}^{(\alpha)} - \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \right) \\ &= \hat{\mathbf{S}}^{(\alpha)} \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} = \frac{\mu r^2}{4} \left( \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)} + \mathbf{t}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}^{(\alpha)} \right) \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (4.28) \end{aligned}$$

と与える。なお、本研究ではこのように $\xi^{(\alpha)}$ に速度形構成式を考えるため、 $\tau_b^{(\alpha)}$ は厳密には式(3.30)<sub>3</sub>を物質時間微分した

$$\dot{\tau}_b^{(\alpha)} = -(\operatorname{div} \xi^{(\alpha)})^\bullet = -\operatorname{div} \dot{\xi}^{(\alpha)} + \operatorname{grad} \xi^{(\alpha)} \cdot \mathbf{L}^T \dots\dots\dots (4.29)$$

の時間積算量として得られることを述べておく。

### 4.3 硬化則

本節では、すべり速度に対する硬化則および流れ応力の発展式を示す。

#### 4.3.1 すべり速度硬化則

従来の結晶塑性論および転位-結晶塑性論では、金属材料のすべり速度依存性を簡潔に表現するために次式の粘塑性形のべき乗則が多用される<sup>(116)(117)</sup>。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_r^{(\alpha)} \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{1/m} \dots\dots\dots (4.30)$$

ここで、 $\dot{\gamma}_r^{(\alpha)}$ は参照すべり速度、 $m$ はひずみ速度感度指数、 $g^{(\alpha)}$ は塑性変形の抵抗力に相当する流れ応力である。また、 $\operatorname{sgn}(\bullet)$ は $(\bullet)$ の符号を与える記号である。従来の理論では、3.2節で述べたように塑性変形の駆動力は分解せん断応力となる( $\hat{\tau}^{(\alpha)} = \tau^{(\alpha)}$ および $\tau_b^{(\alpha)} = 0$ )ため、式(4.30)は $\tau^{(\alpha)}$ が $g^{(\alpha)}$ を超えた場合に塑性変形が生じることを表している。また、 $\operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)})$ により $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ と $\tau^{(\alpha)}$ の符号は一致し、駆動力の負荷される方向に変形が生じるという極めて自然な現象を表現している。

一方、高次応力を考慮した本理論では、塑性変形の駆動力は有効応力 $\hat{\tau}^{(\alpha)} = \tau^{(\alpha)} - \tau_b^{(\alpha)}$ となる。そこで、Kuroda-Tvergaard<sup>(65)</sup>は高次理論に適したすべり速度則として式(4.30)を次のように拡張している。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_r^{(\alpha)} \operatorname{sgn}(\hat{\tau}^{(\alpha)}) \left| \frac{\hat{\tau}^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{1/m} \dots\dots\dots (4.31)$$

すなわち、式(4.30)における $\tau^{(\alpha)}$ を $\hat{\tau}^{(\alpha)}$ に置き換えただけであり、式(4.31)の物理的描像は式(4.30)に等しい。また、式(4.31)を $\hat{\tau}^{(\alpha)}$ について解けば

$$\hat{\tau}^{(\alpha)} = g^{(\alpha)} \operatorname{sgn}(\dot{\gamma}^{(\alpha)}) \left| \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\dot{\gamma}_r^{(\alpha)}} \right|^m \dots \dots \dots (4.32)$$

となる。なお、 $\dot{\gamma}_r^{(\alpha)}$ は正值の材料定数であり、 $g^{(\alpha)}$ は一般に金属材料の加工硬化の程度を表現する正值の量となる<sup>(51)(53)</sup>。

### 4.3.2 流れ応力の発展式

一般に、金属材料における加工硬化は材料内部で転位等の結晶欠陥が増殖することで生じる。材料内部の転位密度と塑性変形の抵抗力を結び付ける式として Bailey-Hirsch の式<sup>(87)</sup>が知られており、Ohashi<sup>(61)</sup>は転位の相互作用を表現するために一般的な Bailey-Hirsch の式を多すべり系に拡張した次式を提案している。

$$g^{(\alpha)} = \tau_r^{(\alpha)} + a^{(\alpha)} \mu^{(\alpha)} \tilde{b}^{(\alpha)} \sum_{\beta} \Omega^{(\alpha\beta)} \sqrt{\rho_h^{(\beta)}} \dots \dots \dots (4.33)$$

ここで、 $\tau_r^{(\alpha)}$ は格子摩擦応力と呼ばれる量であり、絶対零度で Peierls 応力と等価となり有限温度では原子の熱振動の寄与により変動する温度依存の量である。また、 $a^{(\alpha)}$ は転位の張り出しと関連した 0.1 オーダの数値係数<sup>(118)</sup>、 $\mu^{(\alpha)}$ は横弾性係数および  $\Omega^{(\alpha\beta)}$ は $\alpha = \beta$ のとき自己硬化、 $\alpha \neq \beta$ のとき潜在硬化の程度を表すすべり系間相互作用行列の成分である。さらに、 $\rho_h^{(\beta)}$ は加工硬化に寄与する転位密度である。 $\rho_h^{(\beta)}$ に導入する転位密度の選択には任意性があり、例えば Fleck ら<sup>(72)</sup>、Evers ら<sup>(111)</sup>は $\rho_h^{(\beta)} = \rho_G^{(\beta)} + \rho_S^{(\beta)}$ 、Kondo ら<sup>(74)</sup>は $\rho_h^{(\beta)} = \rho_G^{(\beta)}$ 、Ohashi<sup>(119)</sup>は $\rho_h^{(\beta)} = \rho_S^{(\beta)}$ とそれぞれ定義している。なお、2.7節で述べたように、GN 転位は孤立転位を表現するため周囲に長範囲的な内部応力場を発生させる一方で、SS 転位は転位対を表すため周囲に短範囲的な内部応力場を形成すると考えられる。ここで、本理論では GN 転位が作用する長範囲的な内部応力は $\tau_b^{(\alpha)}$ を通じて $\hat{\tau}^{(\alpha)}$ に含まれるため、式(4.31)右辺において絶対値内の分子に考慮される。それに対して、式(4.31)右辺絶対値内の分母となる $g^{(\alpha)}$ は短範囲的な応力場を表現するものとして $\hat{\tau}^{(\alpha)}$ と $g^{(\alpha)}$ の内部応力場に関するオーダを区別すれば、 $g^{(\alpha)}$ の引数には SS 転位密度を選択するのが適切と考えられる。すなわち、本研究では $\rho_h^{(\alpha)} = \rho_S^{(\alpha)}$ として流れ応力を次式で与える。

$$g^{(\alpha)} = \tau_r^{(\alpha)} + a^{(\alpha)} \mu^{(\alpha)} \tilde{b}^{(\alpha)} \sum_{\beta} \Omega^{(\alpha\beta)} \sqrt{\rho_S^{(\beta)}} \dots \dots \dots (4.34)$$

また、一般に $g^{(\alpha)}$ のような内部変数は、現変形状態までの履歴に依存した内部構造の変化を記述するために発展式形で与えられる<sup>(101)(106)</sup>。そこで、式(4.34)の物質時間微分をとり、SS 転位密度の定義式(2.153)を代入すれば、流れ応力の発展式が次式のように得られる。

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h^{(\alpha\beta)} \left| \dot{\gamma}^{(\beta)} \right|, \quad h^{(\alpha\beta)} = \frac{a^{(\alpha)} \mu^{(\alpha)} \tilde{b}^{(\alpha)}}{2} \frac{\Omega^{(\alpha\beta)} c^{(\beta)}}{\tilde{b}^{(\beta)} L^{(\beta)} \sqrt{\rho_S^{(\beta)}}} \dots \dots \dots (4.35)$$

ただし、本研究では  $\tau_f^{(\alpha)}$  を時間非依存量とみなしている。また、式(4.35)における  $h^{(\alpha\beta)}$  は従来の結晶塑性論<sup>(51)(120)</sup>における硬化係数に対応する。さらに、現変形状態における流れ応力は式(4.35)を次のように時間積分して得られる。

$$\mathbf{g}^{(\alpha)} = \mathbf{g}_0^{(\alpha)} + \int \dot{\mathbf{g}}^{(\alpha)} dt \dots\dots\dots (4.36)$$

ここで、 $\mathbf{g}_0^{(\alpha)}$  は流れ応力の初期値である臨界分解せん断応力 (CRSS: critical resolved shear stress) であり、式(4.34)において  $\rho_S^{(\alpha)} = \rho_0^{(\alpha)}$  とすることで計算される。ただし、 $\rho_0^{(\alpha)}$  は2.7.3項で述べた初期転位密度である。また、流れ応力の計算には転位の平均飛行距離  $L^{(\alpha)}$  の具体形を定義せねばならない。そこで、本研究では近藤ら<sup>(60)</sup>が提案した次式を用いる。

$$L^{(\alpha)} = \frac{c^{*(\alpha)}}{\sqrt{\sum_{\beta} \omega^{(\alpha\beta)} (\rho_G^{(\beta)} + \rho_S^{(\beta)})}} \dots\dots\dots (4.37)$$

ここで、 $c^{*(\alpha)}$  は転位の易動度を表す数値係数、 $\omega^{(\alpha\beta)}$  は転位の平均飛行距離に対する潜在硬化の程度を表す相互作用行列の成分である。以上の流れ応力の発展式は従来の転位-結晶塑性モデルと同一の形式である。ここで、本研究で扱う高次理論の体系では、式(4.27)で導入した特性長  $r$  を  $r \rightarrow 0$  とした場合に高次応力  $\xi^{(\alpha)}$  は零となり従来の理論に帰着するはずである。実際に、 $\xi^{(\alpha)} \rightarrow \mathbf{0}$  となれば背応力も  $\tau_b^{(\alpha)} = -\text{div} \xi^{(\alpha)} \rightarrow 0$  となる。すなわち、式(4.30)の逆関係を考慮すれば、前述のように  $r \rightarrow 0$  に対応して

$$\hat{\tau}^{(\alpha)} \rightarrow \tau^{(\alpha)} = \mathbf{g}^{(\alpha)} \text{sgn}(\dot{\gamma}^{(\alpha)}) \left| \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\dot{\gamma}_r^{(\alpha)}} \right|^m \dots\dots\dots (4.38)$$

となるはずである。しかしながら、式(4.32)はもともと式(4.38)右辺と等価であり、式(4.32)で与えた  $\hat{\tau}^{(\alpha)}$  は特性長に全く依存していないことがわかる。そこで、この矛盾を解決するために本研究では  $\mathbf{g}^{(\alpha)}$  を特性長依存の関数に修正することで  $\hat{\tau}^{(\alpha)}$  に特性長依存性を導入する。

まず、Gurtin<sup>(104)</sup>が導入した次式の有効すべり速度  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  を考える。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} \equiv \sqrt{(\dot{\gamma}^{(\alpha)})^2 + l^2 (\nabla^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)})^2} \dots\dots\dots (4.39)$$

ここで、 $\nabla^{(\alpha)}$  は式(2.151)で定義した  $\alpha$  すべり面内の接線こう配演算子であり、 $l$  はエネルギー散逸に寄与する特性長である。Gurtin<sup>(104)</sup> は、 $\xi^{(\alpha)}$  は保存および散逸仕事の両方をなすと考え、 $l$  を  $r$  とは独立な特性長として導入している。しかしながら、本研究では  $\xi^{(\alpha)}$  は散逸仕事しかなさないと考えるため、 $l$  は  $r$  に関連した量と考えることができる。 $l$  の物理的描像を検討するために、式(4.39)を式(2.152)を用いて次のように書き直す。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \sqrt{(\dot{\gamma}^{(\alpha)})^2 + l^2 (\tilde{b}^{(\alpha)} \bar{\rho}_G^{(\alpha)})^2} \dots\dots\dots (4.40)$$

すなわち、有効すべり速度はGN転位の運動速度に関連した量であることがわかる。一般に、GN転位は微分幾何学におけるねじれに対応すると考えられるため<sup>(81)(85)(86)</sup>、GN転位近傍の結晶格子には曲率が生じる。したがって、図4.2に示すように同一すべり面上の前方に位置するGN転位に

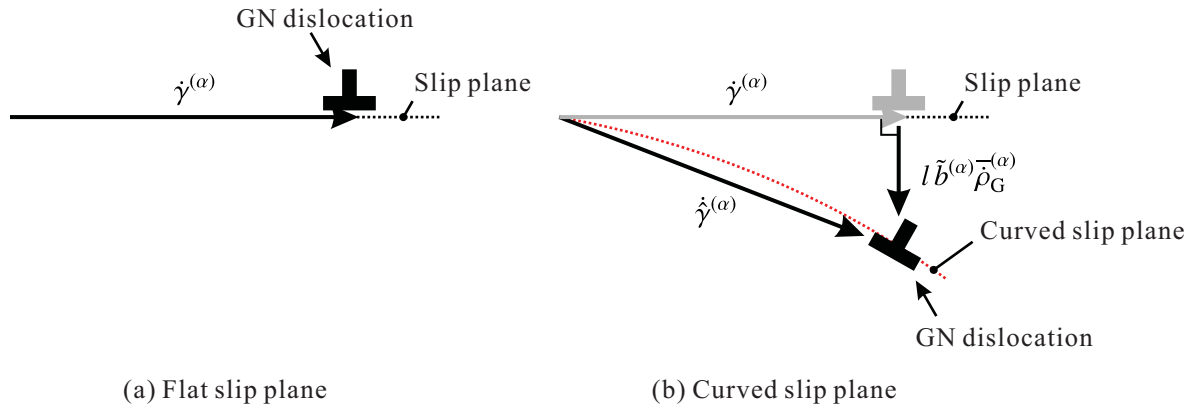


Fig. 4.2 Schematic effective slip rate and curvature of slip plane due to GN dislocation.

よってすべり面がゆがむため、実際のすべり速度はすべり面が平坦な場合と比較して大きなものとなる。すなわち、 $l$ はGN転位による空間のゆがみが与えるすべり速度への影響の程度を表す物性値であるといえる。本研究では、2つの特性長 $l$ と $r$ は相互に関連した量であると考え、次式で定義する特性長比 $\varepsilon_1$ を用いてそれらの量を結び付ける。

$$\varepsilon_1 \equiv \frac{l}{r} \quad \text{or} \quad l \equiv \varepsilon_1 r \dots \dots \dots (4.41)$$

さて、式(2.153)に示したSS転位密度の定義はすべり面が平坦な場合に考えられるのものであった[補足A.7参照]。そこで、式(4.39)の有効すべり速度を用いてSS転位密度の定義を次のように修正する。

$$\dot{\rho}_S^{(\alpha)} = \frac{c^{(\alpha)}}{\tilde{b}^{(\alpha)} L^{(\alpha)}} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.42)$$

そして、式(4.34)の物質時間微分をとったものに式(4.42)を代入すれば、次式の修正された流れ応力発展式が得られる、

$$\dot{\mathbf{g}}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h^{(\alpha\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad h^{(\alpha\beta)} = \frac{a^{(\alpha)} \mu^{(\alpha)} \tilde{b}^{(\alpha)}}{2} \frac{\Omega^{(\alpha\beta)} c^{(\beta)}}{\tilde{b}^{(\beta)} L^{(\beta)} \sqrt{\rho_S^{(\beta)}}} \dots \dots \dots (4.43)$$

また、現時刻の流れ応力は式(4.43)の時間積分により

$$\mathbf{g}^{(\alpha)} = \mathbf{g}_0^{(\alpha)} + \int \dot{\mathbf{g}}^{(\alpha)} dt \dots \dots \dots (4.44)$$

と得られる。なお、転位の平均飛行距離 $L^{(\alpha)}$ の定義には従来と同じく式(4.37)を用いるが、導入するSS転位密度には式(4.42)の定義を適用する。

以上より、流れ応力は特性長 $r$ の関数となり、有効応力の定義に式(4.32)を用いた場合にも $r \rightarrow 0$ の極限で $\dot{\gamma}^{(\alpha)} \rightarrow \dot{\gamma}^{(\alpha)}$ となるため、式(4.38)が成立する。したがって、本節で構築した高次理論の体系に従来の理論が内包されることがわかる。なお、本理論において $l$ はSS転位密度および流れ応力のみならず、短範囲オーダーで生じる現象を特徴づける量と考えて $l$ を微視的特性長と呼ぶこととする。それにともない、特性長比を $\varepsilon_1 = 0.01 \sim 0.1$ オーダーと考える。

## 4.4 速度形弾・粘塑性構成式

4.1節で導出した速度形弾塑性構成式(4.10)におけるすべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ に、前節で示した式(4.31)の粘塑性形のすべり速度硬化則を考えれば高次応力を考慮した転位-結晶塑性論における速度形弾・粘塑性構成式が得られる。なお、5.1節で述べる速度形仮想仕事の原理は、Jaumann速度表示の応力速度 $\dot{\mathbf{T}}$ を用いることで簡潔に記述される。ここで、Jaumann速度は任意の2階のテンソル $\underline{\mathbf{A}}$ に対して

$$\dot{\underline{\mathbf{A}}} \equiv \underline{\dot{\mathbf{A}}} - \mathbf{W}\underline{\mathbf{A}} + \underline{\mathbf{A}}\mathbf{W} \dots \dots \dots (4.45)$$

と定義される客観性を有する速度であり、共回転速度とも称される<sup>(80)</sup>。そこで、後の定式化の利便性のために式(4.10)の客観速度をJaumann速度形式に書き換えると次式のようなになる。

$$\dot{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^e : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \mathbf{E}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.46)$$

ただし、 $\dot{\mathbf{T}}$ は

$$\dot{\mathbf{T}} = \dot{\underline{\mathbf{T}}} - \mathbf{W}\underline{\mathbf{T}} + \underline{\mathbf{T}}\mathbf{W} \dots \dots \dots (4.47)$$

であり、 $\mathbf{E}^{(\alpha)}$ は次式のように定義される2階の対称テンソルである。

$$\mathbf{E}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)} + \mathbf{P}_A^{(\alpha)} \mathbf{T} - \mathbf{T} \mathbf{P}_A^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.48)$$

したがって、 $\dot{\underline{\mathbf{T}}}$ も対称テンソルとなる。

## 4.5 活動すべり系の選択

1.1.2項で述べたように、LPSO相ではMgと同様に(0001)⟨11 $\bar{2}$ 0⟩底面系の活動が支配的となる<sup>(27)</sup>。また、非底面系は柱面系や錐面系の活動が確認されている<sup>(27)(35)(38)</sup>。さらに、Mgで頻繁に生じる{10 $\bar{1}$ 2}⟨ $\bar{1}$ 011⟩引張双晶は発生しない<sup>(17)(27)</sup>一方で、LPSO相単結晶のマイクロ試験片において{11 $\bar{2}$ 1}⟨ $\bar{1}$ 1 $\bar{2}$ 6⟩引張双晶の発生が報告されているが<sup>(36)(37)</sup>、その発生頻度に関して不明瞭な点が多い。以上の実験観察事実を踏まえて、本研究では活動が明確に確認されている(0001)⟨11 $\bar{2}$ 0⟩底面系(3つ)、{10 $\bar{1}$ 0}⟨1 $\bar{2}$ 10⟩柱面系(3つ)および{11 $\bar{2}$ 2}⟨11 $\bar{2}$ 3⟩二次錐面系(6つ)の計12すべり系の活動を硬化則の計算に考慮する。なお、図1.12(c)の一次錐面系は数値解析において底面系と柱面系の組み合わせにより表現可能なため、その活動は陽に考慮しない。したがって、すべり系の量を表す $(\bullet)^{(\alpha)}$ およびその和記号 $\sum_{\alpha}$ において $\alpha = 1 \sim 12$ となる。

## 5章

# 速度形仮想仕事の原理

本章では、前章までに構築した高次応力を考慮した転位-結晶塑性モデルに基づいて大変形の記述に適した速度形仮想仕事の原理を導出する。また、高次理論で新たに導入される高次量に対する境界条件の物理的描像および従来理論における速度形仮想仕事の原理との対応を述べる。

### 5.1 高次理論における速度形仮想仕事の原理

仮想仕事率の原理は既に3.2節にて述べているが、有限な弾塑性変形を記述するためには速度形に拡張せねばならない。そこで本節では、3.2節で示した仮想仕事率の原理に基づいて速度形仮想仕事の原理を導出する。

まず、慣性力を無視できるような準静的問題を考える場合、高次理論における仮想仕事率の原理は式(3.9)、式(3.13)、式(3.22)および式(3.27)より次式のように表される。

$$\int_{\mathcal{V}} \mathbf{T} \cdot \dot{\mathbf{D}} \, dv - \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \bar{\tau}_b^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv + \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \boldsymbol{\xi}^{(\alpha)} \cdot \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv = \oint_{\mathcal{S}} \mathbf{t}^{(n)} \cdot \dot{\mathbf{v}} \, da + \sum_{\alpha} \oint_{\mathcal{S}} \zeta^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, da \dots \dots \dots (5.1)$$

ここで、 $\dot{\mathbf{v}}$  および  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  はそれぞれ運動学的に可容な仮想速度および仮想すべり速度であり、

$$\text{grad } \dot{\mathbf{v}} = \dot{\mathbf{L}} = \dot{\mathbf{L}}^e + \sum_{\alpha} \mathbf{P}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.2)$$

の関係式を介して独立に与えられる。また、本研究では物体力は無視している。さらに、式(3.31)より力学的境界条件は次式で与えられる。

$$\text{on } \mathcal{S} : \left. \begin{array}{l} \mathbf{t}^{(n)} = \mathbf{T} \mathbf{n} \\ \zeta^{(\alpha)} = \boldsymbol{\xi}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{n} \end{array} \right\} \dots \dots \dots (5.3)$$

続いて、式(5.1)を初期配置  $\beta_{(1)}$  の量で記述すれば次のように書ける。

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}_{(1)}} \mathbf{II} \cdot \text{Grad } \dot{\mathbf{v}} \, dv_{(1)} - \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}_{(1)}} \bar{\tau}_b^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv_{(1)} + \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}_{(1)}} \boldsymbol{\xi}^{(\alpha)} \cdot \text{Grad } \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv_{(1)} \\ & = \oint_{\mathcal{S}_{(1)}} \mathbf{t}^{(0)} \cdot \dot{\mathbf{v}} \, da_{(1)} + \sum_{\alpha} \oint_{\mathcal{S}_{(1)}} \zeta^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, da_{(1)} \dots \dots \dots (5.4) \end{aligned}$$

ここで、 $\text{Grad}(\bullet)$  は初期配置の座標に関するこう配を表し、面積要素および体積要素の配置変換には

$$\mathbf{n} da = J \mathbf{F}^{-T} \mathbf{n}_{(1)} da_{(1)}, \quad dv = J dv_{(1)} \dots \dots \dots (5.5)$$

を適用し、各内力をそれぞれ次のように定義している。

$$\mathbf{II} \equiv J \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T}, \quad \check{\tau}_b^{(\alpha)} \equiv J \tau_b^{(\alpha)}, \quad \check{\xi}^{(\alpha)} \equiv J \xi^{(\alpha)} \mathbf{F}^{-T} \dots \dots \dots (5.6)$$

ここで、 $\mathbf{II}$  は第1種 Piola-Kirchhoff 応力である。また、初期配置における力学的境界条件は次式となる。

$$\text{on } \mathcal{S}_{(1)} : \left. \begin{array}{l} \overset{(0)}{\mathbf{t}} = \mathbf{II} \mathbf{n}_{(1)} \\ \overset{(0)}{\zeta}^{(\alpha)} = \check{\xi}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{n}_{(1)} \end{array} \right\} \dots \dots \dots (5.7)$$

仮想量は任意であるため、 $\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{0}$  および  $\dot{\check{\gamma}}^{(\alpha)} = \mathbf{0}$  の条件下で式 (5.4) の両辺に物質時間微分を施せば次式が得られる。

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}_{(1)}} \dot{\mathbf{II}} \cdot \text{Grad } \check{\mathbf{v}} dv_{(1)} - \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}_{(1)}} \dot{\check{\tau}}_b^{(\alpha)} \check{\gamma}^{(\alpha)} dv_{(1)} + \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}_{(1)}} \dot{\check{\xi}}^{(\alpha)} \cdot \text{Grad } \check{\gamma}^{(\alpha)} dv_{(1)} \\ &= \oint_{\mathcal{S}_{(1)}} \overset{(0)}{\mathbf{t}} \cdot \check{\mathbf{v}} da_{(1)} + \sum_{\alpha} \oint_{\mathcal{S}_{(1)}} \overset{(0)}{\zeta}^{(\alpha)} \check{\gamma}^{(\alpha)} da_{(1)} \dots \dots \dots (5.8) \end{aligned}$$

また、対応する境界条件は式 (5.7) の物質時間微分により

$$\text{on } \mathcal{S}_{(1)} : \left. \begin{array}{l} \overset{(0)}{\dot{\mathbf{t}}} = \dot{\mathbf{II}} \mathbf{n}_{(1)} \\ \overset{(0)}{\dot{\zeta}}^{(\alpha)} = \dot{\check{\xi}}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{n}_{(1)} \end{array} \right\} \dots \dots \dots (5.9)$$

と書ける。式 (5.8) および式 (5.9) はそれぞれ total Lagrange 形式の速度形仮想仕事の原理および力学的境界条件である。また、式 (5.6) で定義した各力の物質時間微分をとれば、それぞれ次のようになる。

$$\left. \begin{aligned} \dot{\mathbf{II}} &= J \left[ \dot{\mathbf{T}} + (\text{tr } \mathbf{L}) \mathbf{T} - \mathbf{T} \mathbf{L}^T \right] \mathbf{F}^{-T} = J \left[ \dot{\mathbf{T}} - (\mathbf{D} \mathbf{T} + \mathbf{T} \mathbf{D}) + (\text{tr } \mathbf{L}) \mathbf{T} + \mathbf{L} \mathbf{T} \right] \mathbf{F}^{-T} \\ \dot{\check{\tau}}_b^{(\alpha)} &= J \left[ \dot{\tau}_b^{(\alpha)} + (\text{tr } \mathbf{L}) \tau_b^{(\alpha)} \right] \\ \dot{\check{\xi}}^{(\alpha)} &= J \left[ \dot{\xi}^{(\alpha)} + (\text{tr } \mathbf{L}) \xi^{(\alpha)} - \mathbf{L} \xi^{(\alpha)} \right] \mathbf{F}^{-T} = J \left[ \check{\xi}^{(\alpha)} - \mathbf{D} \xi^{(\alpha)} + (\text{tr } \mathbf{L}) \xi^{(\alpha)} - \sum_{\beta} \mathbf{P}_A^{(\beta)} \xi^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\beta)} \right] \mathbf{F}^{-T} \end{aligned} \right\} \dots \dots (5.10)$$

ここで、 $\dot{\mathbf{J}} = J \text{tr } \mathbf{L}$  の関係を用いている。式 (5.10) を式 (5.8) に代入して現配置  $\beta_{(c)}$  の量で書き表せば、現配置における速度形仮想仕事の原理が次式のように得られる。

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}} \left[ \dot{\mathbf{T}} - (\mathbf{D} \mathbf{T} + \mathbf{T} \mathbf{D}) + (\text{tr } \mathbf{L}) \mathbf{T} + \mathbf{L} \mathbf{T} \right] \cdot \check{\mathbf{L}} dv - \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \left[ \dot{\tau}_b^{(\alpha)} + (\text{tr } \mathbf{L}) \tau_b^{(\alpha)} \right] \check{\gamma}^{(\alpha)} dv \\ &+ \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \left[ \check{\xi}^{(\alpha)} - \mathbf{D} \xi^{(\alpha)} + (\text{tr } \mathbf{L}) \xi^{(\alpha)} - \sum_{\beta} \mathbf{P}_A^{(\beta)} \xi^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\beta)} \right] \cdot \check{\mathbf{v}} \check{\gamma}^{(\alpha)} dv \end{aligned}$$



$$= \oint_{\mathcal{S}} \overset{\cdot}{\mathbf{t}}^{(n)} \cdot \check{\mathbf{v}} \, da + \sum_{\alpha} \oint_{\mathcal{S}} \overset{\cdot}{\boldsymbol{\zeta}}^{(n)} \check{\boldsymbol{\gamma}}^{(\alpha)} \, da \dots\dots\dots (5.11)$$

ただし,  $\overset{\cdot}{\mathbf{t}}^{(n)} \, da \equiv \overset{\cdot}{\mathbf{t}}^{(0)} \, da_{(1)}$ ,  $\overset{\cdot}{\boldsymbol{\zeta}}^{(n)} \, da \equiv \overset{\cdot}{\boldsymbol{\zeta}}^{(0)} \, da_{(1)}$  とおいており, 各表面力はそれぞれ次式で表される.

$$\overset{\cdot}{\mathbf{t}}^{(n)} = \left[ \overset{\cdot}{\mathbf{T}} + (\text{tr } \mathbf{L}) \mathbf{T} - \mathbf{T} \mathbf{L}^T \right] \mathbf{n}, \quad \overset{\cdot}{\boldsymbol{\zeta}}^{(n)} = \left[ \overset{\cdot}{\boldsymbol{\xi}}^{(\alpha)} + (\text{tr } \mathbf{L}) \boldsymbol{\xi}^{(\alpha)} - \mathbf{L} \boldsymbol{\xi}^{(\alpha)} \right] \cdot \mathbf{n} \dots\dots\dots (5.12)$$

また, updated Lagrange 形式の定式化では参照配置と現配置を一致させるため, 式 (5.11) において  $\overset{\cdot}{\mathbf{t}}^{(n)} \rightarrow \overset{\cdot}{\mathbf{t}}^{(n)}$ ,  $\overset{\cdot}{\boldsymbol{\zeta}}^{(n)} \rightarrow \overset{\cdot}{\boldsymbol{\zeta}}^{(n)}$  となる. さらに, 微小弾性変形の仮定より体積一定 ( $\text{tr } \mathbf{L} = 0$ ) を仮定すれば, updated Lagrange 形式の速度形仮想仕事の原理が次のように得られる.

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}} \left[ \overset{\cdot}{\mathbf{T}} - (\mathbf{D} \mathbf{T} + \mathbf{T} \mathbf{D}) + \mathbf{L} \mathbf{T} \right] \cdot \check{\mathbf{L}} \, dv - \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \overset{\cdot}{\mathbf{t}}_b^{(\alpha)} \check{\boldsymbol{\gamma}}^{(\alpha)} \, dv + \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \left( \overset{\cdot}{\boldsymbol{\xi}}^{(\alpha)} - \mathbf{D} \boldsymbol{\xi}^{(\alpha)} - \sum_{\beta} \mathbf{P}_A^{(\beta)} \boldsymbol{\xi}^{(\alpha)} \check{\boldsymbol{\gamma}}^{(\beta)} \right) \cdot \nabla \check{\boldsymbol{\gamma}}^{(\alpha)} \, dv \\ & = \oint_{\mathcal{S}} \overset{\cdot}{\mathbf{t}}^{(n)} \cdot \check{\mathbf{v}} \, da + \sum_{\alpha} \oint_{\mathcal{S}} \overset{\cdot}{\boldsymbol{\zeta}}^{(n)} \check{\boldsymbol{\gamma}}^{(\alpha)} \, da \dots\dots\dots (5.13) \end{aligned}$$

また, 対応する力学的境界条件は

$$\text{on } \mathcal{S} : \left. \begin{aligned} \overset{\cdot}{\mathbf{t}}^{(n)} &= (\overset{\cdot}{\mathbf{T}} - \mathbf{T} \mathbf{L}^T) \mathbf{n} \\ \overset{\cdot}{\boldsymbol{\zeta}}^{(n)} &= (\overset{\cdot}{\boldsymbol{\xi}}^{(\alpha)} - \mathbf{L} \boldsymbol{\xi}^{(\alpha)}) \cdot \mathbf{n} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (5.14)$$

となる. したがって, 規定量を  $\underline{(\bullet)}$  で表せば, 境界条件は幾何学的境界条件と対応する力学的条件を合わせて

$$\text{on } \mathcal{S} : \left. \begin{aligned} \mathbf{v} &= \underline{\mathbf{v}} \quad \text{or} \quad \overset{\cdot}{\mathbf{t}}^{(n)} = \underline{\overset{\cdot}{\mathbf{t}}^{(n)}} \\ \dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(\alpha)} &= \underline{\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(\alpha)}} \quad \text{or} \quad \overset{\cdot}{\boldsymbol{\zeta}}^{(n)} = \underline{\overset{\cdot}{\boldsymbol{\zeta}}^{(n)}} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (5.15)$$

と表される. 式 (5.15)<sub>1</sub> は従来の理論と同じく速度および表面力速度に対する境界条件であり, 式 (5.15)<sub>2</sub> は高次理論で新たに導入されるすべり速度および高次表面力速度に対する境界条件となる. 従来の理論では, 高次応力が存在しないため式 (5.15)<sub>2</sub> のようにすべり速度あるいはひずみ速度に対する境界条件を設定できない. 一方, 高次理論ではすべり速度の境界条件を設定できるため, 実験における試料と治具の接触条件あるいは結晶粒界における変形条件をより正確に表現可能といえる.

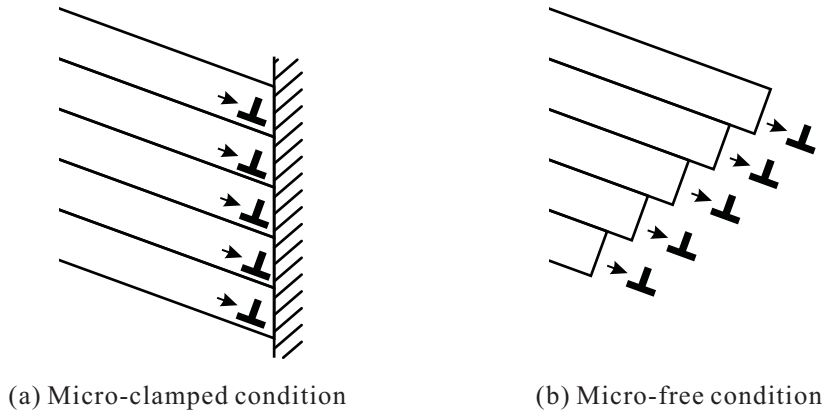


Fig. 5.1 Boundary conditions for slip rate and higher-order stress.

### 5.2 高次量に対する境界条件

高次理論における仮想仕事率の原理式 (5.1) を解くにあたって、すべり速度  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  およびそれに共役な高次表面力  $\zeta^{(n)(\alpha)}$  に対する境界条件として次の条件を用いることが多い (69)(70)(121).

$$\text{on } \mathcal{S} : \left. \begin{array}{l} \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \quad (\text{micro-clamped condition}) \\ \text{or} \\ \zeta^{(n)(\alpha)} = 0 \quad (\text{micro-free condition}) \end{array} \right\} \dots\dots\dots (5.16)$$

式 (5.16)<sub>1</sub> はすべり拘束境界条件 (または micro-clamped condition) と呼ばれ、図 5.1(a) に示すように物体表面が剛体に接しており、表面において変形が妨げられることを表している. したがって、境界上ではすべりは生じない. 一方、式 (5.16)<sub>2</sub> はすべり自由境界条件 (または micro-free condition) と呼ばれ、図 5.1(b) に示すように物体表面は高次表面力が作用しない自由表面となり、容易に変形が生じることを表している. したがって、この場合には境界上ですべりは有限となる.

本研究では、式 (5.13) および式 (5.15) のように速度形の仮想仕事の原理を考えるため、式 (5.16) で示した高次量に対する境界条件を次のように拡張する.

$$\text{on } \mathcal{S} : \left. \begin{array}{l} \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \quad (\text{micro-clamped condition}) \\ \text{or} \\ \dot{\zeta}^{(n)(\alpha)} = 0 \quad (\text{micro-free condition}) \end{array} \right\} \dots\dots\dots (5.17)$$

式 (5.17)<sub>1</sub> は式 (5.16)<sub>1</sub> と同様にすべり拘束境界条件を、式 (5.17)<sub>2</sub> は式 (5.16)<sub>2</sub> と同様にすべり自由境界条件をそれぞれ表している.

ここで、高次量に対する式 (5.17) の境界条件をより詳細に検討するために、式 (5.13) を通常の力学的釣合い式とその他の式に分解することを考える. 式 (5.13) は任意の仮想量  $\tilde{v}$  および  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  に対して常に成立せねばならないため、Bittencourt<sup>(70)</sup> は (a)  $\dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0$  および (b)  $\tilde{v} = \mathbf{0}$  の場合の 2 通りの過程をそれぞれ次のように考えている.

(a)  $\ddot{\gamma}^{(\alpha)} = 0$  の場合

可容な仮想すべり速度を  $\dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0$  と考える場合, 全ての変形は弾性的に生じる. したがって, 式 (5.13) は

$$\int_{\mathcal{V}} \left[ \dot{T} - (DT + TD) + LT \right] \cdot \dot{L} \, dv = \oint_{\mathcal{S}} \overset{(n)}{t} \cdot \dot{v} \, da \dots \dots \dots (5.18)$$

と書ける. ただし, 仮想速度こう配は  $\dot{L} = \dot{L}^e$  である. 式 (5.18) は従来の連続体理論における updated Lagrange 形式の速度形仮想仕事の原理に等しい<sup>(103)</sup>.

(b)  $\dot{v} = 0$  の場合

可容な仮想速度を  $\dot{v} = 0$  と考えた場合, 式 (5.2) より  $\dot{L} = 0$  となる. すなわち, 式 (5.2) より

$$\dot{L}^e = - \sum_{\alpha} P^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} = -\dot{L}^p \dots \dots \dots (5.19)$$

のように弾性変形と塑性変形が同量かつ逆方向に生じ, 互いに打消し合って全変形量は零となる場合に相当する. このとき, 式 (5.13) は

$$- \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \overset{(n)}{\tau}_b^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv + \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \left( \overset{(n)}{\xi}^{(\alpha)} - D \xi^{(\alpha)} - \sum_{\beta} P_A^{(\beta)} \xi^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\beta)} \right) \cdot \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv = \sum_{\alpha} \oint_{\mathcal{S}} \overset{(n)}{\xi}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, da \dots \dots \dots (5.20)$$

となる. また, 式 (5.20) に式 (5.14)<sub>2</sub> を代入して発散定理を適用すれば次式が導かれる.

$$\sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \left( \overset{(n)}{\tau}_b^{(\alpha)} + \text{div} \dot{\xi}^{(\alpha)} - \text{grad} \xi^{(\alpha)} \cdot L^T \right) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv = 0 \dots \dots \dots (5.21)$$

ただし, 微小弾性変形の仮定より体積変化を無視している. さらに, 式 (4.29) を代入すれば

$$\sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \left( \text{div} \dot{\xi}^{(\alpha)} - \text{div} \dot{\xi}^{(\alpha)} \right) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv = 0 \dots \dots \dots (5.22)$$

となり, 式 (4.17) および式 (2.131) を式 (5.22) に代入すれば

$$\sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left[ \nabla \left( \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} - \frac{1}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{t}^{(\alpha)} \right) \cdot \boldsymbol{t}^{(\alpha)} - \nabla \left( \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} + \frac{1}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{s}^{(\alpha)} \right) \cdot \boldsymbol{s}^{(\alpha)} \right] \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv = 0 \dots \dots \dots (5.23)$$

と書ける. すなわち, 高次理論における速度形仮想仕事の原理は GN 転位密度の釣合い式として書き換えることができる. また, GN 転位密度の定義式 (2.131) を考慮すれば, 式 (5.23) は次のようにらせん成分および刃状成分に分解して表せる.

$$\left. \begin{aligned} \int_{\mathcal{V}} \left( \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} - \frac{1}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{t}^{(\alpha)} \right) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv = 0 \\ \int_{\mathcal{V}} \left( \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} + \frac{1}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{s}^{(\alpha)} \right) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv = 0 \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (5.24)$$

ここで, 式 (5.24) は式 (2.131) の 2 式にそれぞれ任意の重み関数 (ここでは  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  に相当) を乗じて体積積分をとったものに等しいことがわかる. したがって, 式 (5.24) は速度形の GN 転位密度の弱形

式による定義といえる．また，式(5.24)における $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ を任意の重み関数 $\check{\rho}$ に等値し，発散定理を適用して式(5.24)を次のように変形する．

$$\left. \begin{aligned} \int_{\mathcal{V}} \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \check{\rho} \, dv &= -\frac{1}{\bar{b}^{(\alpha)}} \int_{\mathcal{V}} (\text{grad } \check{\rho} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv - \frac{1}{\bar{b}^{(\alpha)}} \int_{\mathcal{V}} \check{\rho} (\text{div } \mathbf{t}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv + \frac{1}{\bar{b}^{(\alpha)}} \oint_{\mathcal{S}} \check{\rho} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, da \\ \int_{\mathcal{V}} \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \check{\rho} \, dv &= \frac{1}{\bar{b}^{(\alpha)}} \int_{\mathcal{V}} (\text{grad } \check{\rho} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv + \frac{1}{\bar{b}^{(\alpha)}} \int_{\mathcal{V}} \check{\rho} (\text{div } \mathbf{s}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv - \frac{1}{\bar{b}^{(\alpha)}} \oint_{\mathcal{S}} \check{\rho} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, da \end{aligned} \right\} (5.25)$$

ここで，式(5.25)の2式においてそれぞれ右辺第3項にすべり速度に対する境界条件が要請されることがわかる．

以上の2通りの変形過程を考えることで，式(5.13)は式(5.18)および式(5.25)の2種類の式に分解することができる．また，その際の境界条件として式(5.15)<sub>1</sub>は式(5.18)に，式(5.15)<sub>2</sub>は式(5.25)にそれぞれ課されると考えられる．ここで，高次量の境界条件に注目すると，式(5.25)で要請される境界条件として Kuroda-Tvergaard<sup>(122)</sup>は式(5.17)との対応を踏まえて次のように与えている．

$$\left. \begin{aligned} \text{on } \mathcal{S} : & \quad \underbrace{(\mathbf{n} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0, \quad (\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0}_{\text{or}} \quad (\text{micro-clamped condition}) \\ & \quad \underbrace{\dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} = 0, \quad \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} = 0}_{\text{or}} \quad (\text{micro-free condition}) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (5.26)$$

すなわち，式(5.26)<sub>1</sub>は物体表面におけるすべりの外向き法線方向流れの拘束を表しているため，すべり拘束境界条件に対応する．また，この条件は図5.1(a)に示すように境界においてGN転位の流出入がないことを表す．一方，式(5.26)<sub>2</sub>は図5.1(b)に示すように物体表面を通して容易にGN転位の流出入が生じ，境界でGN転位密度は零となることを表している．したがって，この条件はすべり自由境界条件に対応する．以上より，式(5.17)<sub>2</sub>の高次表面力に対する境界条件は，境界におけるGN転位密度の流出入条件に相当すると考えられる．したがって，高次理論に基づくFEM解析を行う場合には，自由表面において式(5.17)<sub>2</sub>を，その他の表面または結晶粒界などの境界において式(5.17)<sub>1</sub>の条件をそれぞれ課することが妥当と考えられる．

### 5.3 従来の理論における速度形仮想仕事の原理

前節までに示した式(5.13)および式(5.15)において背応力，高次応力および高次表面力を消去することで，高次理論の特殊ケースとして従来の理論における速度形仮想仕事の原理および境界条件が得られる．すなわち，従来の理論における updated Lagrange 形式の速度形仮想仕事の原理は式(5.18)と同じく次式で表される．

$$\int_{\mathcal{V}} \left[ \overset{\circ}{\mathbf{T}} - (\mathbf{D}\mathbf{T} + \mathbf{T}\mathbf{D}) + \mathbf{L}\mathbf{T} \right] \cdot \dot{\mathbf{L}} \, dv = \oint_{\mathcal{S}} \overset{(n)}{\mathbf{t}} \cdot \dot{\mathbf{v}} \, da \dots\dots\dots (5.27)$$

また，境界条件は式(5.15)より

$$\text{on } \mathcal{S} : \quad \mathbf{v} = \underline{\mathbf{v}} \quad \text{or} \quad \overset{(n)}{\mathbf{t}} = \underline{\overset{(n)}{\mathbf{t}}} \dots\dots\dots (5.28)$$

となる．しかしながら，高次応力を考慮しない場合においても本理論では式 (5.15)<sub>2</sub> の高次量に対する境界条件を適切に与えなければならない．そこで，従来の理論を想定した場合，高次応力は物体内の全領域および全表面において恒等的に零となるため，その境界条件は全境界において

$$\text{on } \mathcal{S} : \quad \dot{\zeta}^{(n)} = \dot{\underline{\zeta}}^{(n)} = 0 \quad \dots\dots\dots (5.29)$$

と課すのが妥当と考えられる．前述のように，式 (5.29) で表される境界条件は，全境界上で GN 転位が完全に抜け切ることを表現している（図 5.1(b) 参照）．

本研究では，7 章において特性長を零とした場合の数値解析も実施するが，その際に解く支配方程式は式 (5.27) となるため，その解析における高次量に対する境界条件には式 (5.29) を適用する．

## 6章

# FEM 解析のための定式化

本章では高次理論における支配方程式を FEM 解析で解くために、前章で導出した速度形仮想仕事の原理の離散化を行う。その際、数値計算コスト削減のために接線係数法の考え方に基づいてすべり速度硬化則の顕著な非線形性を軽減させる。また、数値計算の安定化を図るために  $r_{\min}$  法を導入する。

### 6.1 有効応力増分の線形化

式 (4.31) あるいは式 (4.32) からわかるように  $\dot{\gamma}^{(a)}$  と  $\dot{\tau}^{(a)}$  は極めて強い非線形関係を有する。通常、FEM 解析は離散化した時間増分ステップ  $\Delta t$  間で各共役量をそれぞれ線形化して解くため、FEM 解析により式 (4.31) を正確に評価するためには極めて小さい時間増分を必要とし、莫大な計算コストを要する。そこで本研究では、計算コスト削減のために Okumura ら<sup>(123)</sup> が提案した接線係数法<sup>(124)(125)</sup> の応用を用いて  $\dot{\gamma}^{(a)}$  と  $\dot{\tau}^{(a)}$  の関係を線形化する。

まず、離散化した時刻  $t$  および  $t + \Delta t$  の間のすべり増分  $\Delta \gamma^{(a)}$  について考える。時刻  $t$  におけるすべり速度を  ${}^t\dot{\gamma}^{(a)}$ 、時刻  $t + \Delta t$  におけるすべり速度を  ${}^{t+\Delta t}\dot{\gamma}^{(a)}$  と表し、 $\Delta \gamma^{(a)}$  を次のように線形補間する。

$$\Delta \gamma^{(a)} = \left[ (1 - \theta^{\tan}) {}^t\dot{\gamma}^{(a)} + \theta^{\tan} {}^{t+\Delta t}\dot{\gamma}^{(a)} \right] \Delta t \dots \dots \dots (6.1)$$

ここで、 $\theta^{\tan}$  は  $0 \leq \theta^{\tan} \leq 1$  の値を有する数値係数であり、式 (6.1) は  $\theta^{\tan} = 0$  のとき前進 Euler 法（陽解法）、 $\theta^{\tan} = 1/2$  のとき Crank-Nickolson 法および  $\theta^{\tan} = 1$  のとき後退 Euler 法（陰解法）にそれぞれ対応する。なお、 $1/2 \leq \theta^{\tan} \leq 1$  のときに弾・粘塑性変形に対する増分計算は安定化することが知られている<sup>(124)(125)</sup>。式 (6.1) における  ${}^{t+\Delta t}\dot{\gamma}^{(a)}$  は未知量であるため、式 (4.31) の関係に時刻  $t$  まわりのテーラー展開を施し、1次近似を行えば  ${}^{t+\Delta t}\dot{\gamma}^{(a)}$  が次のように得られる。

$$\begin{aligned} {}^{t+\Delta t}\dot{\gamma}^{(a)} &\approx {}^t\dot{\gamma}^{(a)} + \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^{(a)}}{\partial t} \right|_t \Delta t = {}^t\dot{\gamma}^{(a)} + \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^{(a)}}{\partial \dot{\tau}^{(a)}} \right|_t \dot{\tau}^{(a)} \Delta t + \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^{(a)}}{\partial \mathbf{g}^{(a)}} \right|_t \dot{\mathbf{g}}^{(a)} \Delta t \\ &= {}^t\dot{\gamma}^{(a)} + \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^{(a)}}{\partial \dot{\tau}^{(a)}} \right|_t \Delta \dot{\tau}^{(a)} + \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^{(a)}}{\partial \mathbf{g}^{(a)}} \right|_t \Delta \mathbf{g}^{(a)} \dots \dots \dots (6.2) \end{aligned}$$

ここで、 ${}^t(\bullet)$  および  ${}^{t+\Delta t}(\bullet)$  はそれぞれ時刻  $t$  および  $t + \Delta t$  における量を表す。また、式 (6.2) において

2行目への式変形では  $\Delta\hat{\tau}^{(\alpha)} = {}^t\dot{\hat{\tau}}^{(\alpha)}\Delta t$  および  $\Delta g^{(\alpha)} = {}^t\dot{g}^{(\alpha)}\Delta t$  なる関係を用いている。式(6.2)を式(6.1)に代入すれば

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} = \left( {}^t\dot{\gamma}^{(\alpha)} + \theta \tan \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \hat{\tau}^{(\alpha)}} \Big|_t \Delta\hat{\tau}^{(\alpha)} + \theta \tan \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial g^{(\alpha)}} \Big|_t \Delta g^{(\alpha)} \right) \Delta t \dots\dots\dots (6.3)$$

を得る。ここまでの理論展開は通常の接線係数法<sup>(124)(125)</sup>に従うものであるが、Okumuraら<sup>(123)</sup>は式(6.3)における  $\Delta\gamma^{(\alpha)}$  と  $\Delta\hat{\tau}^{(\alpha)}$  の線形関係に着目して、式(6.3)を

$$\Delta\hat{\tau}^{(\alpha)} = \hat{\theta}^{(\alpha)} \left( \Delta\gamma^{(\alpha)} - {}^t\dot{\gamma}^{(\alpha)}\Delta t - \theta \tan \Delta t \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial g^{(\alpha)}} \Big|_t \Delta g^{(\alpha)} \right) \dots\dots\dots (6.4)$$

のように  $\Delta\hat{\tau}^{(\alpha)}$  について解いている。ここで、

$$\hat{\theta}^{(\alpha)} \equiv \frac{1}{\left( \theta \tan \Delta t \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \hat{\tau}^{(\alpha)}} \Big|_t \right)} \dots\dots\dots (6.5)$$

である。また、流れ応力増分は式(4.43)より

$$\Delta g^{(\alpha)} = \sum_{\beta} {}^t h^{(\alpha\beta)} \Delta\hat{\gamma}^{(\beta)} \dots\dots\dots (6.6)$$

と書ける。ここで、有効すべり速度を式(4.40)および式(4.41)より

$$\dot{\hat{\gamma}}^{(\alpha)} = \sqrt{1 + \left( \varepsilon_1 r \frac{\tilde{b}^{(\alpha)} \bar{\rho}_G^{(\alpha)}}{\dot{\gamma}^{(\alpha)}} \right)^2} \operatorname{sgn}(\dot{\gamma}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (6.7)$$

と書き直し、有効すべり増分を次のように近似する。

$$\Delta\hat{\gamma}^{(\alpha)} \approx \sqrt{1 + \left( \varepsilon_1 r \frac{\tilde{b}^{(\alpha)} {}^t\bar{\rho}_G^{(\alpha)}}{{}^t\dot{\gamma}^{(\alpha)}} \right)^2} \operatorname{sgn}({}^t\dot{\gamma}^{(\alpha)}) \Delta\gamma^{(\alpha)} = {}^t k^{(\alpha)} \Delta\gamma^{(\alpha)} \dots\dots\dots (6.8)$$

ただし、

$${}^t k^{(\alpha)} \equiv \sqrt{1 + \left( \varepsilon_1 r \frac{\tilde{b}^{(\alpha)} {}^t\bar{\rho}_G^{(\alpha)}}{{}^t\dot{\gamma}^{(\alpha)}} \right)^2} \operatorname{sgn}({}^t\dot{\gamma}^{(\alpha)}) \dots\dots\dots (6.9)$$

である。したがって、流れ応力増分は

$$\Delta g^{(\alpha)} = \sum_{\beta} {}^t h^{(\alpha\beta)} {}^t k^{(\beta)} \Delta\gamma^{(\beta)} \dots\dots\dots (6.10)$$

と書くことができ、式(6.10)を式(6.4)に代入すれば次式のようなになる。

$$\Delta\hat{\tau}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} L^{(\alpha\beta)} \Delta\gamma^{(\beta)} - \dot{\phi}^{(\alpha)} \Delta t \dots\dots\dots (6.11)$$



ここで,

$$\left. \begin{aligned} L^{(\alpha\beta)} &\equiv \hat{\theta}^{(\alpha)} \left( \delta^{(\alpha\beta)} - \theta^{\tan} \Delta t \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial g^{(\alpha)}} \Big|_t h^{(\alpha\beta)} t k^{(\beta)} \right), \\ \dot{\hat{\phi}}^{(\alpha)} &\equiv \hat{\theta}^{(\alpha)} t \dot{\gamma}^{(\alpha)} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (6.12)$$

であり, 式(4.31)より時刻  $t$  における微係数はそれぞれ

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \hat{\tau}^{(\alpha)}} \Big|_t &= \left( \frac{1}{m t \hat{\tau}^{(\alpha)}} \right) \dot{\gamma}_r^{(\alpha)} \operatorname{sgn}(t \hat{\tau}^{(\alpha)}) \left| \frac{t \hat{\tau}^{(\alpha)}}{t g^{(\alpha)}} \right|^{1/m}, \\ \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial g^{(\alpha)}} \Big|_t &= \left( -\frac{1}{m t g^{(\alpha)}} \right) \dot{\gamma}_r^{(\alpha)} \operatorname{sgn}(t \hat{\tau}^{(\alpha)}) \left| \frac{t \hat{\tau}^{(\alpha)}}{t g^{(\alpha)}} \right|^{1/m} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (6.13)$$

と表せる. ただし,  $\delta^{(\alpha\beta)}$  は Kronecker のデルタである. したがって, 式(6.11)の両辺を  $\Delta t$  で除すと有効応力の物質時間微分を次のようにすべり速度に対して線形化できる.

$$\dot{\hat{\tau}}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} L^{(\alpha\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)} - \dot{\hat{\phi}}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (6.14)$$

また, 分解せん断応力の物質時間微分は式(3.23)より

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\tau}}^{(\alpha)} &= (\mathbf{T} \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)})^{\vee} = \overset{\vee}{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} = (\mathbf{C}^e : \mathbf{D}^e) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \\ &= (\mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}) \cdot \mathbf{D}^e = (\mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}) \cdot \mathbf{D} - \sum_{\beta} (\mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}) \cdot \mathbf{P}_S^{(\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)} \dots \dots \dots (6.15) \end{aligned}$$

となる. ただし, 式(6.15)の導出には  $\mathbf{T}$ ,  $\overset{\vee}{\mathbf{T}}$ ,  $\mathbf{C}^e$  の対称性および式(4.19), 式(4.20)の結晶基底の発展式を用いている. したがって, 背応力の物質時間微分は式(3.25)より

$$\dot{\hat{\tau}}_b^{(\alpha)} = \dot{\hat{\tau}}^{(\alpha)} - \dot{\hat{\tau}}^{(\alpha)} = (\mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}) \cdot \mathbf{D} - \sum_{\beta} R^{(\alpha\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)} + \dot{\hat{\phi}}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (6.16)$$

と書ける. ただし,

$$R^{(\alpha\beta)} \equiv L^{(\alpha\beta)} + (\mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}) \cdot \mathbf{P}_S^{(\beta)} \dots \dots \dots (6.17)$$

である. 式(6.16)を式(5.13)に代入すれば, 接線係数法を適用した updated Lagrange 形式の速度形仮想仕事の原理が次のように導かれる.

$$\begin{aligned} &\int_{\mathcal{V}} \left\{ \left[ \overset{\vee}{\mathbf{T}} - (\mathbf{D}\mathbf{T} + \mathbf{T}\mathbf{D}) \right] \cdot \overset{\vee}{\mathbf{D}} + (\mathbf{L}\mathbf{T}) \cdot \overset{\vee}{\mathbf{L}} \right\} dv + \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} (\mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}) \cdot \mathbf{D} \dot{\gamma}^{(\alpha)} dv \\ &+ \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \left( \overset{\vee}{\boldsymbol{\xi}}^{(\alpha)} - \mathbf{D} \boldsymbol{\xi}^{(\alpha)} \right) \cdot \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} dv - \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \left\{ \int_{\mathcal{V}} \dot{\gamma}^{(\beta)} R^{(\alpha\beta)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + (\mathbf{P}_A^{(\beta)} \boldsymbol{\xi}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\beta)} \cdot \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right\} dv \\ &= \oint_{\mathcal{S}} \overset{(n)}{\mathbf{t}} \cdot \overset{\vee}{\mathbf{v}} da + \sum_{\alpha} \oint_{\mathcal{S}} \overset{(n)}{\boldsymbol{\xi}}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} da + \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \dot{\hat{\phi}}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} dv \dots \dots \dots (6.18) \end{aligned}$$

ここで、式(6.18)左辺第1項には、 $\dot{\mathbf{T}}$ および $\mathbf{DT} + \mathbf{TD}$ の対称性を考慮している。また、式(6.18)右辺第3項はみかけの粘性仕事である。

最後に、数値計算上の注意点を述べる。式(6.14)における線形関係は、 $\theta^{\tan} = 0$ 、 ${}^t\dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0$ および $\left. \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \dot{\tau}^{(\alpha)}} \right|_t = 0$ となる場合に式(6.5)および式(6.9)が特異となるため成立しない。そこで、これらの特異性を避けるために、7章の数値解析では $\theta^{\tan} = 1$ で固定するとともに式(6.9)および式(6.13)<sub>1</sub>を

$$\left. \begin{aligned} {}^t k^{(\alpha)} &= \sqrt{1 + \left( \frac{\tilde{b}^{(\alpha)} \bar{\rho}_G^{(\alpha)}}{\varepsilon_l r \left( {}^t \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \delta_t \dot{\gamma}_r^{(\alpha)} \right)} \right)^2} \operatorname{sgn} \left( {}^t \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right), \\ \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \dot{\tau}^{(\alpha)}} \right|_t &= \left( \frac{1}{m \dot{\tau}^{(\alpha)}} \right) \dot{\gamma}_r^{(\alpha)} \operatorname{sgn} \left( {}^t \dot{\tau}^{(\alpha)} \right) \left| \frac{{}^t \dot{\tau}^{(\alpha)}}{{}^t \dot{g}^{(\alpha)}} \right|^{1/m} + \delta_t \frac{\dot{\gamma}_r^{(\alpha)}}{{}^t \dot{g}^{(\alpha)}} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (6.19)$$

のように修正する。ここで、 $\delta_t$ は $10^{-3}$ 程度の係数である。同様の手法をOkumuraら<sup>(123)</sup>も行っており、式(6.19)によって上述の特異性を防ぐことができる。

## 6.2 速度形仮想仕事の原理のマトリクス表示

本節では、速度形仮想仕事の原理の離散化の準備として、式(6.18)のマトリクス表示を行う。まず、空間に固定した $xyz$ 系で表される正規直交座標系を導入し、テンソル表記された弾・粘塑性構成式(4.46)および高次応力の構成式(4.28)をマトリクス表示するとそれぞれ次のようになる。

$$\{\dot{\mathbf{T}}\} = [\mathbf{C}^e] \{\mathbf{d}\} - \sum_{\alpha} \{\boldsymbol{\Xi}^{(\alpha)}\} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (6.20)$$

$$\{\check{\boldsymbol{\xi}}^{(\alpha)}\} = [\hat{\mathbf{S}}^{(\alpha)}] \{\nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)}\} \dots \dots \dots (6.21)$$

ここで、

$$\{\dot{\mathbf{T}}\} \equiv \{ \dot{T}_{xx} \quad \dot{T}_{yy} \quad \dot{T}_{zz} \quad \dot{T}_{xy} \quad \dot{T}_{yz} \quad \dot{T}_{zx} \}^T \dots \dots \dots (6.22)$$

$$[\mathbf{C}^e] \equiv \begin{bmatrix} C_{xxxx}^e & C_{xxyy}^e & C_{xxzz}^e & C_{xxxy}^e & C_{xxyz}^e & C_{xxzx}^e \\ C_{yyxx}^e & C_{yyyy}^e & C_{yyzz}^e & C_{yyxy}^e & C_{yyyz}^e & C_{yyzx}^e \\ C_{zzxx}^e & C_{zzyy}^e & C_{zzzz}^e & C_{zzxy}^e & C_{zzyz}^e & C_{zzzx}^e \\ C_{xyxx}^e & C_{xyyy}^e & C_{xyzz}^e & C_{xyxy}^e & C_{xyyz}^e & C_{xyzx}^e \\ C_{yzxx}^e & C_{yzyy}^e & C_{yzzz}^e & C_{yzxy}^e & C_{yzyz}^e & C_{yzzx}^e \\ C_{zxxx}^e & C_{zxyy}^e & C_{zxzz}^e & C_{zxxy}^e & C_{zxyz}^e & C_{zxzx}^e \end{bmatrix} \dots \dots \dots (6.23)$$

$$\{\mathbf{d}\} \equiv \{ D_{xx} \quad D_{yy} \quad D_{zz} \quad 2D_{xy} \quad 2D_{yz} \quad 2D_{zx} \}^T \dots \dots \dots (6.24)$$

$$\{\boldsymbol{\Xi}^{(\alpha)}\} \equiv \{ \Xi_{xx}^{(\alpha)} \quad \Xi_{yy}^{(\alpha)} \quad \Xi_{zz}^{(\alpha)} \quad \Xi_{xy}^{(\alpha)} \quad \Xi_{yz}^{(\alpha)} \quad \Xi_{zx}^{(\alpha)} \}^T \dots \dots \dots (6.25)$$

$$\{\check{\boldsymbol{\xi}}^{(\alpha)}\} \equiv \{ \check{\xi}_x^{(\alpha)} \quad \check{\xi}_y^{(\alpha)} \quad \check{\xi}_z^{(\alpha)} \}^T \dots \dots \dots (6.26)$$

$$[\hat{\mathbf{S}}^{(\alpha)}] \equiv \begin{bmatrix} \hat{S}_{xx}^{(\alpha)} & \hat{S}_{xy}^{(\alpha)} & \hat{S}_{xz}^{(\alpha)} \\ \hat{S}_{yx}^{(\alpha)} & \hat{S}_{yy}^{(\alpha)} & \hat{S}_{yz}^{(\alpha)} \\ \hat{S}_{zx}^{(\alpha)} & \hat{S}_{zy}^{(\alpha)} & \hat{S}_{zz}^{(\alpha)} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (6.27)$$

$$\{\nabla\dot{\gamma}^{(\alpha)}\} \equiv \left\{ \frac{\partial\dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial x} \quad \frac{\partial\dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial y} \quad \frac{\partial\dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial z} \right\}^T \dots\dots\dots (6.28)$$

である．式(6.20)～式(6.28)を考慮して式(6.18)をマトリクス表示すれば次のように書ける．

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}} [(\check{\mathbf{d}})^T (\mathbf{C}^e - [\mathbf{T}_D]) \{\mathbf{d}\} + \{\check{\mathbf{l}}\}^T [\mathbf{T}_L] \{\mathbf{l}\}] \, dv - \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \{\check{\mathbf{d}}\}^T \{\boldsymbol{\Xi}^{(\alpha)}\} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv \\ & - \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} (\dot{\gamma}^{(\alpha)} \{\mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}\}^T \{\mathbf{d}\} + \{\nabla\dot{\gamma}^{(\alpha)}\}^T [\boldsymbol{\xi}_D^{(\alpha)}] \{\mathbf{d}\}) \, dv \\ & + \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \left[ \{\nabla\dot{\gamma}^{(\alpha)}\}^T [\hat{\mathbf{S}}^{(\alpha)}] \{\nabla\dot{\gamma}^{(\alpha)}\} + \sum_{\beta} (\dot{\gamma}^{(\alpha)} R^{(\alpha\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)} - \{\nabla\dot{\gamma}^{(\alpha)}\}^T \{\mathbf{P}_A^{(\beta)} \boldsymbol{\xi}^{(\alpha)}\} \dot{\gamma}^{(\beta)}) \right] \, dv \\ & = \oint_{\mathcal{S}} \{\check{\mathbf{v}}\}^T \{\check{\mathbf{t}}\} \, da + \sum_{\alpha} \oint_{\mathcal{S}} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \check{\zeta}_S^{(\alpha)} \, da + \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \check{\phi}^{(\alpha)} \, dv \dots\dots\dots (6.29) \end{aligned}$$

ここで，

$$[\mathbf{T}_D] \equiv \begin{bmatrix} 2T_{xx} & 0 & 0 & T_{xy} & 0 & T_{zx} \\ 0 & 2T_{yy} & 0 & T_{xy} & T_{yz} & 0 \\ 0 & 0 & 2T_{zz} & 0 & T_{yz} & T_{zx} \\ T_{xy} & T_{xy} & 0 & \frac{1}{2}(T_{xx} + T_{yy}) & \frac{1}{2}T_{zx} & \frac{1}{2}T_{yz} \\ 0 & T_{yz} & T_{yz} & \frac{1}{2}T_{zx} & \frac{1}{2}(T_{yy} + T_{zz}) & \frac{1}{2}T_{xy} \\ T_{zx} & 0 & T_{zx} & \frac{1}{2}T_{yz} & \frac{1}{2}T_{xy} & \frac{1}{2}(T_{zz} + T_{xx}) \end{bmatrix} \dots\dots\dots (6.30)$$

$$\{\mathbf{l}\} \equiv \{ L_{xx} \quad L_{yx} \quad L_{zx} \quad L_{xy} \quad L_{yy} \quad L_{zy} \quad L_{xz} \quad L_{yz} \quad L_{zz} \}^T \dots\dots\dots (6.31)$$

$$[\mathbf{T}_L] \equiv \begin{bmatrix} T_{xx} & 0 & 0 & T_{xy} & 0 & 0 & T_{zx} & 0 & 0 \\ 0 & T_{xx} & 0 & T_{xy} & 0 & 0 & T_{zx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & T_{xx} & 0 & 0 & T_{xy} & 0 & 0 & T_{zx} \\ T_{xy} & 0 & 0 & T_{yy} & 0 & 0 & T_{yz} & 0 & 0 \\ 0 & T_{xy} & 0 & 0 & T_{yy} & 0 & 0 & T_{yz} & 0 \\ 0 & 0 & T_{xy} & 0 & 0 & T_{yy} & 0 & 0 & T_{yz} \\ T_{zx} & 0 & 0 & T_{yz} & 0 & 0 & T_{zz} & 0 & 0 \\ 0 & T_{zx} & 0 & 0 & T_{yz} & 0 & 0 & T_{zz} & 0 \\ 0 & 0 & T_{zx} & 0 & 0 & T_{yz} & 0 & 0 & T_{zz} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (6.32)$$

$$\{\mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}\}$$

$$\equiv \left\{ \{C^e : P_S^{(\alpha)}\}_{xx} \quad \{C^e : P_S^{(\alpha)}\}_{yy} \quad \{C^e : P_S^{(\alpha)}\}_{zz} \quad \{C^e : P_S^{(\alpha)}\}_{xy} \quad \{C^e : P_S^{(\alpha)}\}_{yz} \quad \{C^e : P_S^{(\alpha)}\}_{zx} \right\}^T \dots (6.33)$$

$$[\xi_D^{(\alpha)}] \equiv \begin{bmatrix} \xi_x^{(\alpha)} & 0 & 0 & \frac{1}{2}\xi_y^{(\alpha)} & 0 & \frac{1}{2}\xi_z^{(\alpha)} \\ 0 & \xi_y^{(\alpha)} & 0 & \frac{1}{2}\xi_x^{(\alpha)} & \frac{1}{2}\xi_z^{(\alpha)} & 0 \\ 0 & 0 & \xi_z^{(\alpha)} & 0 & \frac{1}{2}\xi_y^{(\alpha)} & \frac{1}{2}\xi_x^{(\alpha)} \end{bmatrix} \dots (6.34)$$

$$\{P_A^{(\beta)} \xi^{(\alpha)}\} \equiv \left\{ \xi_y^{(\alpha)} P_{[xy]}^{(\beta)} + \xi_z^{(\alpha)} P_{[xz]}^{(\beta)} \quad \xi_x^{(\alpha)} P_{[yx]}^{(\beta)} + \xi_z^{(\alpha)} P_{[yz]}^{(\beta)} \quad \xi_x^{(\alpha)} P_{[zx]}^{(\beta)} + \xi_y^{(\alpha)} P_{[zy]}^{(\beta)} \right\}^T \dots (6.35)$$

$$\{\tilde{v}\} \equiv \left\{ \tilde{v}_x \quad \tilde{v}_y \quad \tilde{v}_z \right\}^T \dots (6.36)$$

$$\{\dot{t}^{(n)}\} \equiv \left\{ \dot{t}_x^{(n)} \quad \dot{t}_y^{(n)} \quad \dot{t}_z^{(n)} \right\}^T \dots (6.37)$$

である。ただし、仮想変形速度行列  $\{\dot{d}\}$  および仮想速度こう配行列  $\{\dot{t}\}$  はそれぞれ式 (6.24) および式 (6.31) の各成分を仮想量に置き換えたものとして定義される。また、実速度ベクトル  $\{\dot{v}\}$  は式 (6.36) の各成分を現実量に置き換えたものである。

なお、高次理論における FEM 解析では、物質点の自由度に  $v$  だけでなく  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  も付与される。そのために本理論における三次元問題では物質点自由度が  $v$  (3 成分) +  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  (12 すべり系の成分) = 15 自由度、二次元問題では  $v$  (2 成分) +  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  (12 成分) = 14 自由度となり、従来の理論に基づく FEM 解析に比べて計算コストが増大化する。そこで、7 章における数値解析では、計算コスト削減のために対象に平面ひずみ条件を適用して二次元解析を実施している。その場合には、式 (6.20)~式 (6.37) における  $z$  成分および  $z$  軸に関連した成分がそれぞれ省略される。

### 6.3 支配方程式の離散化

本節では、FEM を実施するために速度形仮想仕事の原理の空間・時間に関する離散化を行う。

#### 6.3.1 形状関数による離散化および剛性方程式

式 (6.29) は任意の体積  $\mathcal{V}$  およびその表面  $\mathcal{S}$  で成立する。そこで、有限要素法ではまず対象とする  $\mathcal{V}$  および  $\mathcal{S}$  をある程度小さな領域、すなわち有限要素に分割し、その体積  $\mathcal{V}^E$  およびその表面  $\mathcal{S}^E$  において仮想仕事の原理をそれぞれ考える。

通常の有限要素法では、要素 E 内の任意の位置  $\mathbf{x}$  における物理量は要素内に存在する離散点、すなわち節点における物理量を内挿することで得られる。ここで、内挿に用いる補間関数は形状関数と呼ばれる<sup>(126)</sup>。したがって、任意の位置における速度  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$  は節点  $I$  に対する形状関数  $N_v^I(\mathbf{x})$  と節点速度  $\mathbf{v}^I$  を用いて次のように補間される。

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \sum_{I=1}^{n_{nd(v)}} N_v^I(\mathbf{x}) \mathbf{v}^I \dots (6.38)$$

ここで、 $n_{nd(v)}$  は速度の内挿に用いられる一要素あたりの節点数である。同様に、任意の座標  $\mathbf{x}$  は節点座標  $\mathbf{x}^I$  を用いて次のように得られる。

$$\mathbf{x} = \sum_{I=1}^{n_{nd(v)}} N_v^I(\mathbf{x}) \mathbf{x}^I \dots\dots\dots (6.39)$$

ここで、式(6.38)および式(6.39)のように  $\mathbf{v}$  と  $\mathbf{x}$  の補間に同じ形状関数  $N_v^I$  を用いる要素はアイソパラメトリック要素と呼ばれ<sup>(126)</sup>、本研究ではこの要素を用いて FEM 解析を行う。また、仮想速度  $\check{\mathbf{v}}$  の補間も同様に

$$\check{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \sum_{I=1}^{n_{nd(v)}} N_v^I(\mathbf{x}) \check{\mathbf{v}}^I \dots\dots\dots (6.40)$$

のように行う。なお、式(6.38)および式(6.40)のように現実量と仮想量の補間に同じ形状関数を用いる手法はガラーキソ法<sup>(126)</sup>と呼ばれる。

続いて、Bittencourt ら<sup>(70)</sup>と同様に任意の位置におけるすべり速度  $\dot{\gamma}^{(a)}(\mathbf{x})$  を節点  $I$  におけるすべり速度  $\dot{\gamma}^{(a)I}$  を用いて次のように補間する。

$$\dot{\gamma}^{(a)}(\mathbf{x}) = \sum_{I=1}^{n_{nd(\gamma)}} N_\gamma^I(\mathbf{x}) \dot{\gamma}^{(a)I} \dots\dots\dots (6.41)$$

ここで、 $n_{nd(\gamma)}$  はすべり速度の内挿に用いられる一要素あたりの節点数であり、 $N_\gamma^I$  はすべり速度の補間に用いる形状関数である。また、仮想すべり速度  $\check{\dot{\gamma}}^{(a)}(\mathbf{x})$  はガラーキソ法により

$$\check{\dot{\gamma}}^{(a)}(\mathbf{x}) = \sum_{I=1}^{n_{nd(\gamma)}} N_\gamma^I(\mathbf{x}) \check{\dot{\gamma}}^{(a)I} \dots\dots\dots (6.42)$$

のように補間する。ここで、速度およびすべり速度の補間に用いる一要素あたりの節点数は必ずしも一致させる必要はないが、本研究ではそれらを一致させ  $n_{nd(v)} = n_{nd(\gamma)} = n_{nd}$  とする。また、以降は節点  $I$  に対する形状関数も  $N_v^I = N_\gamma^I = N^I$  と表記する。

さて、前節と同様に式(6.38)をマトリクス表示すれば

$$\{\mathbf{v}\} = [\mathbf{N}_v] \{\mathbf{v}_{nd}\} \dots\dots\dots (6.43)$$

と書ける。ただし、

$$\{\mathbf{v}_{nd}\} \equiv \{ v_x^1 \quad v_y^1 \quad v_z^1 \quad v_x^2 \quad v_y^2 \quad v_z^2 \quad \dots \quad v_x^{n_{nd}} \quad v_y^{n_{nd}} \quad v_z^{n_{nd}} \}^T \dots\dots\dots (6.44)$$

$$[\mathbf{N}_v] \equiv \begin{bmatrix} N^1 & 0 & 0 & N^2 & 0 & 0 & \dots & N^{n_{nd}} & 0 & 0 \\ 0 & N^1 & 0 & 0 & N^2 & 0 & \dots & 0 & N^{n_{nd}} & 0 \\ 0 & 0 & N^1 & 0 & 0 & N^2 & \dots & 0 & 0 & N^{n_{nd}} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (6.45)$$

である。続いて、速度こう配  $\mathbf{L}$  は式(6.38)より

$$\mathbf{L} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} = \sum_{I=1}^{n_{nd}} \frac{\partial N^I}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{v}^I \dots\dots\dots (6.46)$$

と書けるため、式(6.31)における  $\{\boldsymbol{l}\}$  は

$$\{\boldsymbol{l}\} = [\mathbf{B}_L]\{\boldsymbol{v}_{\text{nd}}\} \dots \dots \dots (6.47)$$

と書ける。ただし、

$$[\mathbf{B}_L] \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial N^1}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial x} & 0 & 0 & \dots & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial x} & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial x} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N^1}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial x} & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial x} \\ \frac{\partial N^1}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial y} & 0 & 0 & \dots & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial y} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial y} & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N^1}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial y} & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial y} \\ \frac{\partial N^1}{\partial z} & 0 & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial z} & 0 & 0 & \dots & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial z} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial z} & 0 & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial z} & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial z} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N^1}{\partial z} & 0 & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial z} & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial z} \end{bmatrix} \dots \dots \dots (6.48)$$

である。同様に変形速度  $\mathbf{D}$  は式(6.38)より

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial \boldsymbol{x}} + \left( \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial \boldsymbol{x}} \right)^{\text{T}} \right] = \sum_{l=1}^{n_{\text{nd}}} \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial N^l}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{v}^l + \left( \frac{\partial N^l}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{v}^l \right)^{\text{T}} \right] \dots \dots \dots (6.49)$$

と書けるため、式(6.24)における  $\{\boldsymbol{d}\}$  は

$$\{\boldsymbol{d}\} = [\mathbf{B}_D]\{\boldsymbol{v}_{\text{nd}}\} \dots \dots \dots (6.50)$$

となる。ただし、

$$[\mathbf{B}_D] \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial N^1}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial x} & 0 & 0 & \dots & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial y} & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N^1}{\partial z} & 0 & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial z} & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial z} \\ \frac{\partial N^1}{\partial y} & \frac{\partial N^1}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial y} & \frac{\partial N^2}{\partial x} & 0 & \dots & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial y} & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial z} & \frac{\partial N^1}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial z} & \frac{\partial N^2}{\partial y} & \dots & 0 & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial z} & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial y} \\ \frac{\partial N^1}{\partial z} & 0 & \frac{\partial N^1}{\partial x} & \frac{\partial N^2}{\partial z} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial x} & \dots & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial z} & 0 & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial x} \end{bmatrix} \dots \dots \dots (6.51)$$

である。また、仮想速度，仮想速度こう配および仮想変形速度もそれぞれ

$$\{\dot{\mathbf{v}}\} = [\mathbf{N}_v] \{\dot{\mathbf{v}}_{nd}\} \dots \dots \dots (6.52)$$

$$\{\dot{\mathbf{l}}\} = [\mathbf{B}_L] \{\dot{\mathbf{v}}_{nd}\} \dots \dots \dots (6.53)$$

$$\{\dot{\mathbf{d}}\} = [\mathbf{B}_D] \{\dot{\mathbf{v}}_{nd}\} \dots \dots \dots (6.54)$$

と書けるものとする。

次に， $\alpha$ すべり系のすべり速度は式(6.41)の表記の仕方を変えれば

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \{\mathbf{N}_\gamma^{(\alpha)}\} \{\dot{\gamma}_{nd}^{(\alpha)}\} \dots \dots \dots (6.55)$$

と書ける。ただし，

$$\{\dot{\gamma}_{nd}^{(\alpha)}\} \equiv \{ \dot{\gamma}^{(\alpha)1} \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)2} \quad \dots \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)n_{nd}} \}^T \dots \dots \dots (6.56)$$

$$\{\mathbf{N}_\gamma^{(\alpha)}\} \equiv \{ N^1 \quad N^2 \quad \dots \quad N^{n_{nd}} \} \dots \dots \dots (6.57)$$

である。また，すべり速度こう配  $\nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)}$  は式(6.41)より

$$\nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} = \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \mathbf{x}} = \sum_{I=1}^{n_{nd}} \frac{\partial N^I}{\partial \mathbf{x}} \dot{\gamma}^{(\alpha)I} \dots \dots \dots (6.58)$$

と書けるため，式(6.28)における  $\{\nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)}\}$  は

$$\{\nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)}\} = [\mathbf{B}_\gamma^{(\alpha)}] \{\dot{\gamma}_{nd}^{(\alpha)}\} \dots \dots \dots (6.59)$$

と書ける。ただし，

$$[\mathbf{B}_\gamma^{(\alpha)}] \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial N^1}{\partial x} & \frac{\partial N^2}{\partial x} & \dots & \frac{\partial N^{n_{nd}}}{\partial x} \\ \frac{\partial N^1}{\partial y} & \frac{\partial N^2}{\partial y} & \dots & \frac{\partial N^{n_{nd}}}{\partial y} \\ \frac{\partial N^1}{\partial z} & \frac{\partial N^2}{\partial z} & \dots & \frac{\partial N^{n_{nd}}}{\partial z} \end{bmatrix} \dots \dots \dots (6.60)$$

である。また，仮想すべり速度および仮想すべり速度こう配もそれぞれ

$$\ddot{\gamma}^{(\alpha)} = \{\mathbf{N}_\gamma^{(\alpha)}\} \{\ddot{\gamma}_{nd}^{(\alpha)}\} \dots \dots \dots (6.61)$$

$$\{\nabla \ddot{\gamma}^{(\alpha)}\} = [\mathbf{B}_\gamma^{(\alpha)}] \{\ddot{\gamma}_{nd}^{(\alpha)}\} \dots \dots \dots (6.62)$$

と書けるものとする。最後に，各すべり系の節点すべり速度を順に格納した列ベクトルを

$$\{\dot{\gamma}_{nd}\} \equiv \{ \{\dot{\gamma}_{nd}^{(1)}\}^T \quad \{\dot{\gamma}_{nd}^{(2)}\}^T \quad \dots \quad \{\dot{\gamma}_{nd}^{(n)}\}^T \}^T \dots \dots \dots (6.63)$$

と定義し，仮想量も同様に

$$\{\ddot{\gamma}_{nd}\} \equiv \{ \{\ddot{\gamma}_{nd}^{(1)}\}^T \quad \{\ddot{\gamma}_{nd}^{(2)}\}^T \quad \dots \quad \{\ddot{\gamma}_{nd}^{(n)}\}^T \}^T \dots \dots \dots (6.64)$$

と表す.

以上の離散化した関係式を適用すれば, 式 (6.29) は次のように離散化される.

$$\begin{Bmatrix} [\mathbf{K}_{\text{vv}}^{\text{E}}] & [\mathbf{K}_{\text{v}\gamma}^{\text{E}}] \\ [\mathbf{K}_{\text{v}\gamma}^{\text{E}}] & [\mathbf{K}_{\gamma\gamma}^{\text{E}}] \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \{\mathbf{u}_{\text{nd}}\} \\ \{\dot{\boldsymbol{\gamma}}_{\text{nd}}\} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \{\dot{\mathbf{f}}_{\text{vnd}}^{\text{E}}\} \\ \{\dot{\mathbf{f}}_{\gamma\text{nd}}^{\text{E}}\} \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (6.65)$$

ここで,

$$[\mathbf{K}_{\text{vv}}^{\text{E}}] \equiv \int_{\mathcal{V}} \left[ [\mathbf{B}_{\text{D}}]^{\text{T}} \{ [\mathbf{C}^{\text{e}}] - [\mathbf{T}_{\text{D}}] \} [\mathbf{B}_{\text{D}}] + [\mathbf{B}_{\text{L}}]^{\text{T}} [\mathbf{T}_{\text{L}}] [\mathbf{B}_{\text{L}}] \right] \text{d}\mathbf{v} \dots\dots\dots (6.66)$$

$$[\mathbf{K}_{\text{v}\gamma}^{\text{E}}] \equiv - \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} [\mathbf{B}_{\text{D}}]^{\text{T}} \{ \boldsymbol{\Xi}^{(\alpha)} \} [\mathbf{B}_{\gamma}^{(\alpha)}] \text{d}\mathbf{v} \dots\dots\dots (6.67)$$

$$[\mathbf{K}_{\text{v}\gamma}^{\text{E}}] \equiv - \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \left( [\mathbf{N}_{\gamma}^{(\alpha)}]^{\text{T}} \{ \mathbf{C}^{\text{e}} : \mathbf{P}_{\text{S}}^{(\alpha)} \}^{\text{T}} [\mathbf{B}_{\text{D}}] + [\mathbf{B}_{\gamma}^{(\alpha)}]^{\text{T}} [\boldsymbol{\xi}_{\text{D}}^{(\alpha)}] [\mathbf{B}_{\text{D}}] \right) \text{d}\mathbf{v} \dots\dots\dots (6.68)$$

$$[\mathbf{K}_{\gamma\gamma}^{\text{E}}] \equiv \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \left[ [\mathbf{B}_{\gamma}^{(\alpha)}]^{\text{T}} [\hat{\mathbf{S}}^{(\alpha)}] [\mathbf{B}_{\gamma}^{(\alpha)}] + \sum_{\beta} \left( [\mathbf{N}_{\gamma}^{(\alpha)}]^{\text{T}} R^{(\alpha\beta)} [\mathbf{N}_{\gamma}^{(\beta)}] - [\mathbf{B}_{\gamma}^{(\alpha)}]^{\text{T}} \{ \mathbf{P}_{\text{A}}^{(\beta)} \boldsymbol{\xi}^{(\alpha)} \} [\mathbf{N}_{\gamma}^{(\beta)}] \right) \right] \text{d}\mathbf{v} \dots\dots\dots (6.69)$$

$$\{\dot{\mathbf{f}}_{\text{vnd}}^{\text{E}}\} \equiv \oint_{\mathcal{S}} [\mathbf{N}_{\text{v}}]^{\text{T}} \{\dot{\mathbf{t}}^{(\text{n})}\} \text{d}\mathbf{a} \dots\dots\dots (6.70)$$

$$\{\dot{\mathbf{f}}_{\gamma\text{nd}}^{\text{E}}\} \equiv \sum_{\alpha} \oint_{\mathcal{S}} [\mathbf{N}_{\gamma}^{(\alpha)}]^{\text{T}} \dot{\boldsymbol{\zeta}}^{(\alpha)} \text{d}\mathbf{a} + \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} [\mathbf{N}_{\gamma}^{(\alpha)}]^{\text{T}} \dot{\boldsymbol{\phi}}^{(\alpha)} \text{d}\mathbf{v} \dots\dots\dots (6.71)$$

である.

また, 時間に関しては前進 Euler 法を適用して離散化を行う. すなわち, 任意の量  $(\bullet)$  の速度量  $(\dot{\bullet})$  を時間増分幅  $\Delta t$  を用いて

$$(\dot{\bullet}) \approx \frac{\Delta(\bullet)}{\Delta t} \dots\dots\dots (6.72)$$

のように近似する. ここで,  $\Delta(\bullet)$  は時間増分幅  $\Delta t$  における  $(\bullet)$  の増分である. 式 (6.72) を用いて式 (6.65) を増分形に書き直せば, 空間・時間に関して離散化された要素剛性方程式が次のように得られる.

$$\begin{Bmatrix} [\mathbf{K}_{\text{vv}}^{\text{E}}] & [\mathbf{K}_{\text{v}\gamma}^{\text{E}}] \\ [\mathbf{K}_{\text{v}\gamma}^{\text{E}}] & [\mathbf{K}_{\gamma\gamma}^{\text{E}}] \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \{\Delta \mathbf{u}_{\text{nd}}\} \\ \{\Delta \boldsymbol{\gamma}_{\text{nd}}\} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \{\Delta \mathbf{f}_{\text{vnd}}^{\text{E}}\} \\ \{\Delta \mathbf{f}_{\gamma\text{nd}}^{\text{E}}\} \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (6.73)$$

ここで,

$$[\Delta \mathbf{f}_{\text{vnd}}^{\text{E}}] \equiv \oint_{\mathcal{S}} [\mathbf{N}_{\text{v}}]^{\text{T}} \{\Delta \mathbf{t}^{(\text{n})}\} \text{d}\mathbf{a} \dots\dots\dots (6.74)$$

$$[\Delta \mathbf{f}_{\gamma\text{nd}}^{\text{E}}] \equiv \sum_{\alpha} \oint_{\mathcal{S}} [\mathbf{N}_{\gamma}^{(\alpha)}]^{\text{T}} \Delta \boldsymbol{\zeta}^{(\alpha)} \text{d}\mathbf{a} + \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} [\mathbf{N}_{\gamma}^{(\alpha)}]^{\text{T}} \Delta \boldsymbol{\phi}^{(\alpha)} \text{d}\mathbf{v} \dots\dots\dots (6.75)$$

である.



最後に、対象とする構造全体に対して式(6.73)の和をとれば、次式の全体剛性方程式が与えられる。

$$\begin{bmatrix} [\mathbf{K}_{vv}] & [\mathbf{K}_{v\gamma}] \\ [\mathbf{K}_{\gamma v}] & [\mathbf{K}_{\gamma\gamma}] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \{\Delta \mathbf{u}\} \\ \{\Delta \boldsymbol{\gamma}\} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \{\Delta \mathbf{f}_v\} \\ \{\Delta \mathbf{f}_\gamma\} \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (6.76)$$

ここで、

$$[\mathbf{K}] \equiv \begin{bmatrix} [\mathbf{K}_{vv}] & [\mathbf{K}_{v\gamma}] \\ [\mathbf{K}_{\gamma v}] & [\mathbf{K}_{\gamma\gamma}] \end{bmatrix} \dots\dots\dots (6.77)$$

は全体接線剛性マトリクス、 $\{\Delta \mathbf{u}\}$  および  $\{\Delta \boldsymbol{\gamma}\}$  は全節点に関する節点変位増分および節点すべり増分、 $\{\Delta \mathbf{f}_v\}$  および  $\{\Delta \mathbf{f}_\gamma\}$  は全節点に関する節点表面力増分および節点高次表面力増分とみかけの節点粘性力増分の和である。なお、一般化節点変位増分および一般化節点力増分をそれぞれ

$$\{\Delta \mathbf{U}\} \equiv \begin{Bmatrix} \{\Delta \mathbf{u}\}^T & \{\Delta \boldsymbol{\gamma}\}^T \end{Bmatrix}^T, \quad \{\Delta \mathbf{F}\} \equiv \begin{Bmatrix} \{\Delta \mathbf{f}_v\}^T & \{\Delta \mathbf{f}_\gamma\}^T \end{Bmatrix}^T \dots\dots\dots (6.78)$$

と書けば、式(6.76)は

$$[\mathbf{K}]\{\Delta \mathbf{U}\} = \{\Delta \mathbf{F}\} \dots\dots\dots (6.79)$$

と表せる。本項では三次元における支配方程式の離散化を示したが、二次元の平面ひずみ問題を扱う場合には $z$ 軸に関する各成分をそれぞれ省略すればよい。

なお、本項では解くべき支配方程式として速度形仮想仕事の原理式(5.13)に基づいた式(6.18)の離散化を行ったが、5.2節で示したように本理論における仮想仕事の原理は式(5.18)および式(5.25)のように2種類の釣合式(弱形式)に分解することができる。したがって、支配方程式として式(5.18)および式(5.25)の離散化を行い、それに基づくFEM解析を実施することも可能である。その際の離散化の詳細については補足C.1を参照されたい。

### 6.3.2 Gauss 求積法

有限要素法は弱形式の支配方程式を解くため、式(6.66)～式(6.71)のように構造に対して体積積分および面積積分を行う必要がある。一般に、それらの積分を数値解析的に行う場合、Gauss 求積法を用いることが多い。Gauss 求積とは積分の近似値を精度よく求める方法であり、積分値は積分領域内の所定のサンプリング点における被積分関数値に重みを付け、サンプリング点に関して和をとることで得られる。なお、一般にサンプリング点は積分点と呼ばれる。体積積分を例にとると、任意の関数 $f(\mathbf{x})$ の体積積分はGauss 求積によって次のように求めることができる。

$$\int_{\mathcal{V}} f(\mathbf{x}) \, dv_r \approx \sum_{i=1}^{n_{gp}} w^{<i>} f(\mathbf{r}^{<i>}) \det[\mathbf{J}(\mathbf{r}^{<i>})] \dots\dots\dots (6.80)$$

ここで、 $n_{gp}$  は積分点数、 $\mathbf{r}^{<i>}$  および  $w^{<i>}$  はそれぞれ親領域における $i$ 番目の積分点の座標値および重みである。なお、式(6.80)では最後の等式を近似記号にて表記しているが、 $f$ が多項式の場合

にはその次数と積分点数の関係次第で厳密な積分値を求めることができる<sup>(126)</sup>. そのため, 非積分関数が多項式によって近似されることの多い有限要素法では Gauss 求積が好まれる. なお, 親領域における積分点の座標値および重みの詳細については有限要素法に関する良書<sup>(126)~(129)</sup>等を参照されたい.

### 6.3.3 結晶基底の更新

結晶基底の発展式は式(4.19)および式(4.20)により与えられるが, これらの式の時間積分により得られる現時刻の  $\mathbf{s}^{(\alpha)}$  および  $\mathbf{m}^{(\alpha)}$  の正規性および直行性は一般に保たれない. その原因は時間増分幅  $\Delta t$  を有限に設定しているためである. 本研究では, 有限な時間増分を用い, かつ大変形後も結晶基底  $\mathbf{s}^{(\alpha)}$  および  $\mathbf{m}^{(\alpha)}$  の正規性および直行性が十分に保たれるように次式を用いて結晶基底を更新する<sup>(130)</sup>.

$${}^{t+\Delta t}\mathbf{s}^{(\alpha)} = \Delta\mathbf{R}^* {}^t\mathbf{s}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (6.81)$$

$${}^{t+\Delta t}\mathbf{m}^{(\alpha)} = \Delta\mathbf{R}^* {}^t\mathbf{m}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (6.82)$$

ここで,  $\Delta\mathbf{R}^*$  は次式で表される  $\mathbf{R}^*$  の増分である<sup>(103)(130)</sup>.

$$\Delta\mathbf{R}^* \equiv \mathbf{I} + \frac{\sin \omega}{\omega} \mathbf{W}^* \Delta t + \frac{1 - \cos \omega}{\omega^2} (\mathbf{W}^* \Delta t)^2 \dots\dots\dots (6.83)$$

$$\omega^2 \equiv -\frac{\text{tr}[(\mathbf{W}^* \Delta t)^2]}{2} \dots\dots\dots (6.84)$$

なお, 時刻  $t + \Delta t$  における単位従法線ベクトル  ${}^{t+\Delta t}\mathbf{t}^{(\alpha)}$  は, 式(2.126)と同様の考えを用いて  ${}^{t+\Delta t}\mathbf{s}^{(\alpha)}$  および  ${}^{t+\Delta t}\mathbf{m}^{(\alpha)}$  の外積により得られる. すなわち,

$${}^{t+\Delta t}\mathbf{t}^{(\alpha)} = {}^{t+\Delta t}\mathbf{s}^{(\alpha)} \times {}^{t+\Delta t}\mathbf{m}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (6.85)$$

である.

また, 結晶基底の更新にともない結晶格子の向き, すなわち結晶方位は時々刻々と変化する. 異方性弾性係数  $\mathbf{C}^e$  は結晶方位に依存するため, 本解析では  $\mathbf{C}^e$  を増分ステップ毎に更新する.

## 6.4 $r_{\min}$ 法による増分値の修正

6.1 節では接線係数法の考え方を用いて, ある程度大きな時間増分幅  $\Delta t$  を用いた際の計算の低コスト化を図った. しかしながら, 本研究で対象とするキंक変形のように極めて短時間で急激な変形が生じる問題では, 6.1 節に示した手法を用いても十分な計算精度が保たれない可能性がある. すなわち, 時刻  $t$  から  $t + \Delta t$  の間の剛性方程式(6.79)の線形関係が十分に保証されない場合には, 数値計算の安定化をもたらすさらなる措置を要する. そこで本研究では,  $r_{\min}$  法<sup>(131)(132)</sup>を用いて時間増分幅および各増分値の修正を行い, 接線係数法と併用することでキंक変形時の数値計算の安定化を図る.

### 6.4.1 $r_{\min}$ 法

数値計算の不安定性は有限の時間増分幅  $\Delta t$  を用いることに起因しており，その最も直観的な対処法として接線剛性方程式 (6.79) において一般化節点変位増分と一般化節点力増分の線形性が十分保たれる程度まで  $\Delta t$  を小さくすることが考えられる．そこで導入されたのが  $r_{\min}$  法であり，この手法は増分解析中に上述の増分量間の線形性が保たれるように  $\Delta t$  および増分量を決定する手法である (131)(132)．

$r_{\min}$  法による時間増分幅  $\Delta t$  の決定および増分値の修正は以下の手順で行われる．

- (1) 試験的な時間増分幅  $\Delta t_{\text{trial}}$  を用いて接線剛性方程式 (6.79) を解き，一般化節点変位増分の試行値  $\{\Delta U\}_{\text{trial}}$  および一般化節点力増分の試行値  $\{\Delta F\}_{\text{trial}}$  をそれぞれ求める．
- (2) 次項にて定義する比  $r^{(\alpha)}$  を構造全体にわたる全ての積分点で計算し，それらの最小値を  $r_{\min}$  とする．
- (3)  $\Delta t_{\text{trial}}$  に  $r_{\min}$  を乗じたものを正しい時間増分幅  $\Delta t$  と決定する．また，項目 (1) で求めた  $\{\Delta U\}_{\text{trial}}$  および  $\{\Delta F\}_{\text{trial}}$  に対しても同様に  $r_{\min}$  を乗じたもの正しい増分値とする．すなわち，時間増分幅，一般化節点変位増分および一般化節点力増分は次式のようにそれぞれ修正される．

$$\left. \begin{aligned} r_{\min} \times \Delta t_{\text{trial}} &\Rightarrow \Delta t \\ r_{\min} \times \{\Delta U\}_{\text{trial}} &\Rightarrow \{\Delta U\} \\ r_{\min} \times \{\Delta F\}_{\text{trial}} &\Rightarrow \{\Delta F\} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.86)$$

このようにして，時々刻々と変化する解析の安定性に応じて時間増分幅および増分量はそれぞれ修正される．ここで重要となるのは項目 (2) で述べた比  $r^{(\alpha)}$  の定め方であり，次項ではその決定方法について述べる．

### 6.4.2 比 $r^{(\alpha)}$ の定め方

増分解析を行う場合には，増分ステップ内で特定の増分量が大きくなりすぎると式 (6.79) の線形関係が崩れ，計算精度の低下につながる．しかしながら，1.1.2 項で述べたように，キック帯が形成されると局所的に結晶格子が回転し，結果として大きなすべり増分  $\Delta \gamma^{(\alpha)}$  が生じることが予想される (図 1.16 参照)．すなわち，本研究で対象とする解析において非線形性を生む主な要因はすべり増分であると考えられる．そこで本研究では，あらかじめ一増分ステップ間のすべり増分の許容値  $\Delta \gamma_{\text{tol}}$  を設けておき，あるすべり系のすべり増分  $\Delta \gamma^{(\alpha)}$  がその許容値を超えた際に時間増分幅  $\Delta t$  が自動的に小さくなるように比  $r^{(\alpha)}$  を決定する．すなわち，各積分点の各すべり系において比  $r^{(\alpha)}$  を次式のように定義する．

$$r^{(\alpha)} \equiv \left| \frac{\Delta \gamma_{\text{tol}}}{\Delta \gamma^{(\alpha)}} \right| \dots\dots\dots (6.87)$$

このように定めれば， $\Delta \gamma^{(\alpha)}$  が許容値  $\Delta \gamma_{\text{tol}}$  を超えた際に比  $r^{(\alpha)}$  は  $0 < r^{(\alpha)} \leq 1$  となる．この  $r^{(\alpha)}$  の最小値を構造全体で検索し，それを比  $r^{(\alpha)}$  の最小値すなわち  $r_{\min}$  とおく．なお， $r_{\min} \geq 1$  の場合には式 (6.86) の増分値の修正は施さない．

## 7章

# FEM解析結果と考察

本章では、6章で離散化した支配方程式に基づいて Mg 基 LPSO 相の単結晶および多結晶に対する FEM 解析を実施する。ここで、本章は以下の4つの節で構成される。

7.1 節では、解析結果におけるキンク帯の定義を Hess-Barrett<sup>(41)</sup> が提案したキンク帯形成モデルに基づいて示す。

7.2 節では、短冊状の LPSO 相単結晶に対する二次元解析を行い、特性長と試験片寸法の比で定めるスケール比を用いてキンク帯形成のメッシュ依存性を評価する。その際、従来のモデルを用いた FEM 解析における問題点を再確認した後に特性長を有限の値に変化させた解析を行い、キンク帯形成に対する特性長の効果を考察する。また、異なるサイズの試験片に対して同様の解析を行うことで、本モデルが有すると考えられる寸法効果特性を調査する。さらに、特性長比の解析結果への影響について述べる。

7.3 節では、LPSO 相多結晶に対する二次元解析を実施し、結晶粒界におけるすべりの境界条件が変形に与える影響を粒界に堆積した GN 転位密度およびそれともなう背応力場形成の観点から考察する。また、粒界における非底面系の活動について述べる。

7.4 節では、キンク帯を特徴づける回位四重極構造の結晶塑性論的表現ならびに数値解析的表現手法を述べる。また、LPSO 相単結晶におけるキンク帯の回位四重極構造を数値解析的に再現する。

### 7.1 キンク帯の表現

本研究では、キンク帯形成を 1.1.2 項で述べた Hess-Barrett<sup>(41)</sup> が提案したモデルに即して表現する。図 7.1 は、図 1.18 に示した Hess-Barrett<sup>(41)</sup> のキンク帯形成モデルに基づいて、キンク帯に蓄積した転位分布を表示したものである。本モデルでは、2.7 節で述べた2種類の転位密度を用いて、孤立転位の密度を GN 転位密度、転位対の密度を SS 転位密度でそれぞれ表現できる。そこで、キンク帯において孤立転位および転位対が図 7.1 のように分布すると想定した場合、それぞれの密度は図中に示すように GN、SS の両転位密度を用いて表現できると考えられる。すなわち、図 7.1 において上側のキンク境界近傍には負の GN 転位（青）、下側のキンク境界近傍には正の GN 転位（赤）がそれぞれ密集して蓄積し、キンク帯の対角領域には SS 転位（黒）が高密度で蓄積する。したがって、次節以降の解析では、異符号の高 GN 転位密度領域に挟まれ、かつ中央の対角領域に

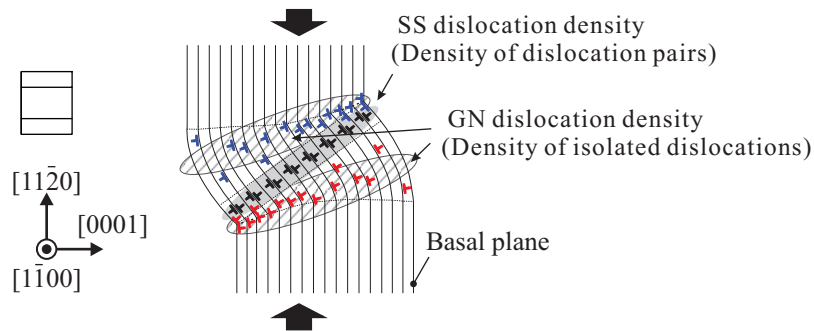


Fig. 7.1 Expression of kink band by GN dislocation density and SS dislocation density based on Hess-Barrett model<sup>(41)</sup>.

SS 転位密度が多く計算された領域をキック帯とみなす。また、キック帯では図 7.1 に示すように結晶格子が任意の角度回転するため、解析結果における前述の GN、SS 転位密度により特徴づけられた領域の結晶方位分布も確認することとする。

## 7.2 LPSO 相単結晶に対する二次元 FEM 解析

本節では、LPSO 相単結晶に対する二次元 FEM 解析を実施し、得られた解析結果に基づいてキック帯形成のメッシュ依存性を評価する。また、特性長および後述するスケール比がキック変形に与える影響を検討するとともに本モデルの寸法効果の有無を調査する。

### 7.2.1 キック帯形成のメッシュ依存性

図 7.2 に本解析に用いる LPSO 単結晶の解析モデルを示す。同図 (a) は解析対象の短冊状 LPSO 相単結晶平板であり、LPSO 相は材料生成過程で細長い板状組織を形成しやすい<sup>(27)</sup> ことを考慮して試験片の縦横比を比較的大きくとしている。また、初期結晶方位は同図 (b) に示すように  $y$  軸に対して底面すべり方向が紙面内で  $\theta = 5^\circ$  傾くように設定する。このような負荷軸に対する底面の初期傾斜  $\theta$  を与える理由は、キック変形は一種のエネルギー的な分岐現象であり、その発生には何らかの初期不整が必要なためである。例えば、底面の初期傾斜がない場合には試験片は  $y$  軸に沿って単純に圧縮されるだけである。また、初期傾斜が  $0 < \theta \leq 1^\circ$  程度の場合には、後述する材料定数および数値パラメータを用いた解析において試験片は弾性的な振る舞いしかせず、本モデルで採用している微小弾性変形の仮定の適用範囲を超えてしまう。さらに、初期傾斜が大きすぎる場合には、通常底面すべりによる塑性変形が試験片全体で発生しキック帯は形成されない。したがって、キック変形を数値解析的に生じさせるためには、有限かつある程度小さな初期傾斜を設定する必要がある。試行的な数値解析を行った結果、底面の初期傾斜の大きさが  $\theta = 3 \sim 10^\circ$  程度の場合に後述するキック変形が生じることを確認しており、ここでは  $\theta = 5^\circ$  と設定している。また、図 7.2(b) の初期方位を設定した場合に最も活動が支配的となる底面系を同図 (c) に示す。このような初期方位では、面外方向 ( $z$  軸方向) の塑性ひずみはすべり系の対称性から互いに打消し合う。また、弾性変形は微小であるため、本解析には平面ひずみ条件を適用できる。なお、図 1.8

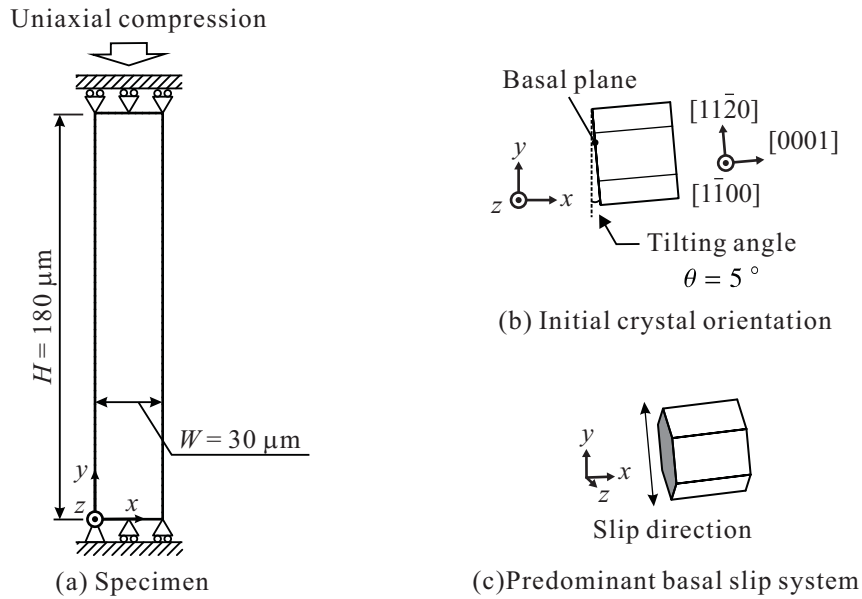


Fig. 7.2 Computational model for LPSO single crystal.

に示すように材料内に存在する LPSO 相の奥行き方向厚さは幅に対して十分大きいいため、LPSO 相のキック変形を平面ひずみ問題として二次元化することは妥当といえる。

解析に用いる境界条件に関しては、5.1 節で述べた速度（変位増分）の境界条件を図 7.2(a) に示すように規定し、試験片の両側面は自由表面とする。また、高次量の境界条件は、従来の理論との比較を容易にするために全表面において式 (5.29) を用いる。すなわち、試験片全表面上で

$$\text{on all } \mathcal{S} : \quad \dot{\zeta}_5^{(a)} = \dot{\zeta}_6^{(a)} = 0 \quad \dots \dots \dots (7.1)$$

のようすべり自由条件を規定する。前述のように高次表面力は零となることから、この条件は図 5.1(b) に示すように GN 転位が表面で完全に抜け切ることを意味している。また、FEM 解析では全節点ですべり増分が未知量として計算される。

本項の解析では、キック帯形成のメッシュ依存性を評価するために図 7.3 に示す 3 通りのメッシュ分割を考える。ここで、図 7.3(a) では  $5 \times 30 = 150$  要素、同図 (b) では  $10 \times 60 = 600$  要素および同図 (c) では  $15 \times 90 = 1350$  要素に分割しており、各要素の初期形状は全て正方形となる。また、それぞれのメッシュ分割には 9 節点四辺形要素を用い、数値積分は Gauss 求積法の完全積分にて行う。

また、常温における変形を想定して表 7.1 に示す物性値および数値パラメータを用いる。ここで、表中の  $(\bullet)^{(\text{bas})}$ 、 $(\bullet)^{(\text{pri})}$ 、 $(\bullet)^{(\text{pyr})}$  および  $(\bullet)^{(\text{all})}$  はそれぞれ底面系、柱面系、二次錐面系および全すべり系共通の量であることを表す。また、異方性弾性係数  $\mathbf{C}^e$  の独立な成分（補足 B.1 参照）には 18R 型構造を有する LPSO 相単結晶に対して報告された値<sup>(133)</sup>を用い、すべり系ごとの横弾性係数  $\mu^{(\alpha)}$  は  $\mathbf{C}^e$  を各すべり系に射影して算出している。すなわち、 $\mu^{(\alpha)} = C_{ijkl}^e s_i^{(\alpha)} m_j^{(\alpha)} s_k^{(\alpha)} m_l^{(\alpha)}$  のように計算される。また、高次応力の構成式 (4.28) における  $\mu$  は等方弾性体に対するものであり、異方性の強い HCP や LPSO 構造では値を定義できないため、本研究では各すべり系の  $\mu^{(\alpha)}$  の平均値として  $\mu = (\sum_{\alpha} \mu^{(\alpha)}) / (\text{Num. of } \alpha)$  と与えている。なお、本モデルのような連続体モデルでは、図 1.2(b) に



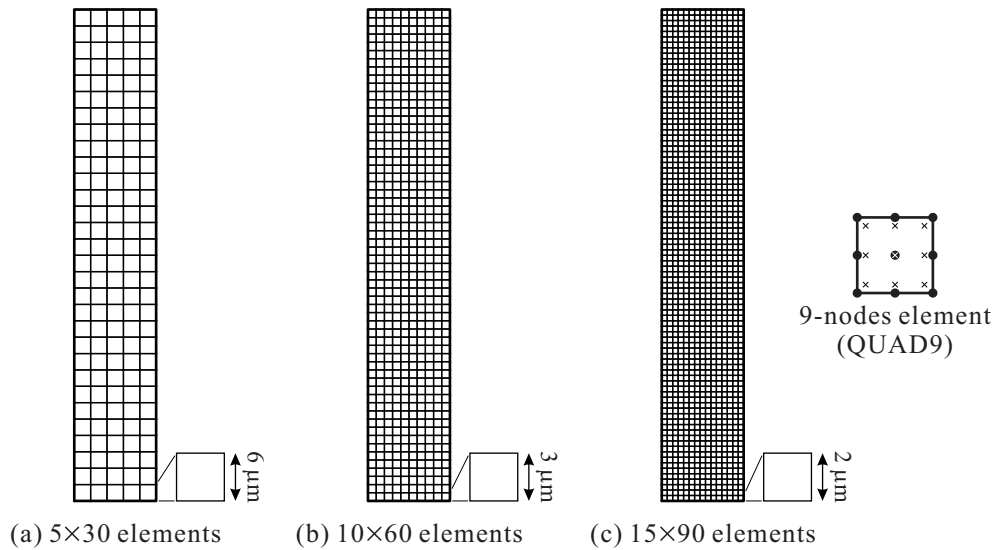


Fig. 7.3 Mesh division of specimen.

示す局所の構造変調を有した LPSO 相の結晶構造を表現できない。そこで、連続体モデルを用いて数値解析を行う際には、LPSO 構造を全体的に捉えて一様な積層構造を有する結晶格子として扱う必要がある。その場合、LPSO 構造の単位格子を形成する積層の多くは Mg 原子で構成される HCP 構造をとるため<sup>(22)</sup>、その格子間隔は平均的に純 Mg のものとほぼ等しいと考えられる。そこで、Burgers ベクトルの大きさ  $\tilde{b}^{(\alpha)}$  には純 Mg の値<sup>(134)</sup>を用いる。また、LPSO 相に対するひずみ速度感度指数  $m$  の正確な値は報告されていないため、本解析では室温における純 Mg の値<sup>(135)</sup>を用いる。これも前述の理由と同様に、LPSO 相の  $m$  は純 Mg のものと大きな違いはないと予想されるためである。転位易動度  $c^{*(\alpha)}$  に関しては、従来の転位-結晶塑性モデルを用いた LPSO 相単結晶マイクロピラーに対する解析を試験的に実施し、実験結果<sup>(35)</sup>とのフィッティングを行った結果を用いている。なお、LPSO 相において底面系の活動が最も生じやすいため、 $c^{*(\alpha)}$  の値は表 7.1 に示すように底面系のものが最大となっている。また、すべり系間の相互作用を表す  $Q^{(\alpha\beta)}$  および  $\omega^{(\alpha\beta)}$  の各成分には簡単のために表 7.1 に示す値を用いる。ただし、図 7.2(b) の初期方位を用いた場合には、塑性変形ならびにキック変形は同図(c)の底面系の単すべりによってもたらされると予想されるため、 $Q^{(\alpha\beta)}$  および  $\omega^{(\alpha\beta)}$  の値は解析結果にほとんど影響を及ぼさないと考えられる。さらに、表 7.1 の諸量を用いた際に式(4.34)から得られる各すべり系の CRSS を表 7.2 に示す。これらの値は LPSO 相の CRSS の実験報告<sup>(27)(35)</sup>と概ね整合しており、逆にいえば CRSS が実験値と整合するように  $\tau_f^{(\alpha)}$  および  $d^{(\alpha)}$  の値を決定している。また、本解析では参照ひずみ速度  $\dot{\gamma}_r^{(\alpha)}$  は簡単のために公称ひずみ速度  $\dot{\epsilon}$  に一致させる。

以上の条件のもと、図 7.2(a) に示すように試験片上端面に  $y$  軸に沿う  $\dot{\epsilon} = 0.001 \text{ s}^{-1}$  の公称ひずみ速度を強制的に与えて圧縮の解析を行う。本項ではまず、特性長  $r$  を零から有限の様々な値に変化させて解析を行い、解析結果のメッシュ依存性の有無を評価する。その際、 $r$  の値に関して簡便に議論するために次式で定めるスケール比を用いる。

$$\varepsilon_s \equiv \frac{r}{H} \dots\dots\dots (7.2)$$



Table7.1 Material constants and numerical parameters.

Elastic modulus <sup>(133)</sup>	$C_{11}^e = 67.7 \text{ GPa}$ , $C_{33}^e = 72.9 \text{ GPa}$ , $C_{44}^e = 21.5 \text{ GPa}$ , $C_{12}^e = 28.3 \text{ GPa}$ , $C_{13}^e = 19.5 \text{ GPa}$
Magnitude of Burgers vector <sup>(134)</sup>	$\tilde{b}^{(\text{bas})} = 0.32 \text{ nm}$ , $\tilde{b}^{(\text{pri})} = 0.32 \text{ nm}$ , $\tilde{b}^{(\text{pyr})} = 0.61 \text{ nm}$
Parameters in higher-order stress [eq. (4.28)]	$\mu = 21.94 \text{ MPa}$
Parameters in slip rule [eq. (4.31)]	$\dot{\gamma}_r^{(\text{all})} = 0.001 \text{ s}^{-1}$ , $m = 0.02$ <sup>(135)</sup>
Parameters in flow rule [eq. (4.43)]	$\tau_f^{(\text{bas})} = 3 \text{ MPa}$ , $\tau_f^{(\text{pri})} = 155 \text{ MPa}$ , $\tau_f^{(\text{pyr})} = 335 \text{ MPa}$ , $\rho_0^{(\text{all})} = 0.1 \mu\text{m}^{-2}$ , $a^{(\text{all})} = 0.3$ , $c^{(\text{all})} = 2$ , $\mu^{(\text{bas})} = 21.50 \text{ GPa}$ , $\mu^{(\text{pri})} = 19.70 \text{ GPa}$ , $\mu^{(\text{pyr})} = 24.61 \text{ GPa}$ , $c^{*(\text{bas})} = 100$ , $c^{*(\text{pri})} = 50$ , $c^{*(\text{pyr})} = 35$ , $\Omega^{(\alpha\beta)} = 1$ , $\omega^{(\alpha\beta)} = \begin{cases} 0 & (\alpha = \beta) \\ 1 & (\alpha \neq \beta) \end{cases}$
Parameters for FEM	$\theta^{\tan} = 1$ , $\delta_t = 10^{-3}$ , $\Delta\gamma_{\text{tol}} = 0.001$ , $\dot{\varepsilon} = 0.001 \text{ s}^{-1}$ , $\Delta t_{\text{trial}} = 0.01 \text{ s}$

Table7.2 CRSS of each slip system.

	Basal	Prismatic	Pyramidal
CRSS [MPa]	10.832	162.18	352.09

ここで、 $H$ は図7.2(a)に示した試験片長辺の大きさである。また、4.3節で述べた微視的特性長 $l$ の具体的な値は不明であるため、解析ではまず $r$ と $l$ の比である特性長比 $\varepsilon_l$ を $\varepsilon_l = 0.1$ に固定する。

(a)  $\varepsilon_s = 0$  の場合 ( $r = 0$  で高次応力を考慮しない従来解析結果)

図7.4は、特性長を $r = 0$ とした場合、すなわちスケール比にして $\varepsilon_s = 0$ とした解析によって得られた公称応力-ひずみ線図である。なお、式(4.28)に示すように $r = 0$ の場合には高次応力および背応力が存在しないため、本モデルは従来の転位-結晶塑性モデルに帰着する。したがって、図7.4の結果は従来モデルを用いた解析結果とみなせる。図7.4より、キック変形の開始とともに公称応力の急激な降下を確認できる。また、キック変形開始前までの応力経路は3種類のメッシュ分

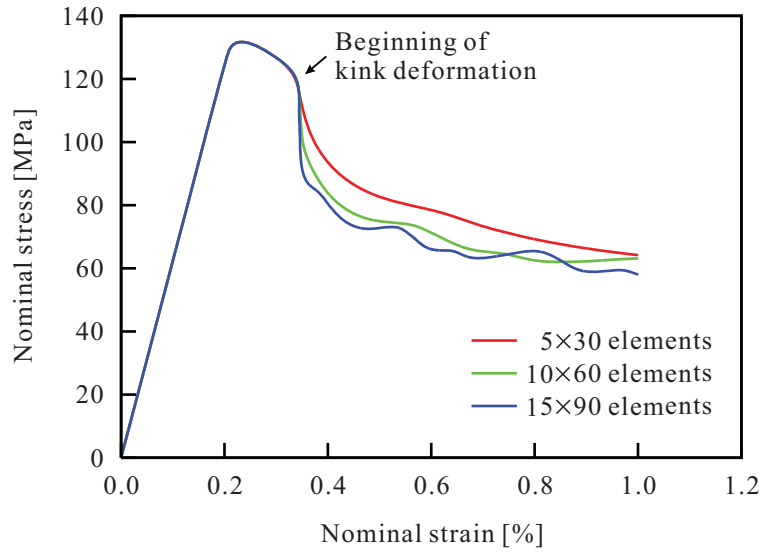


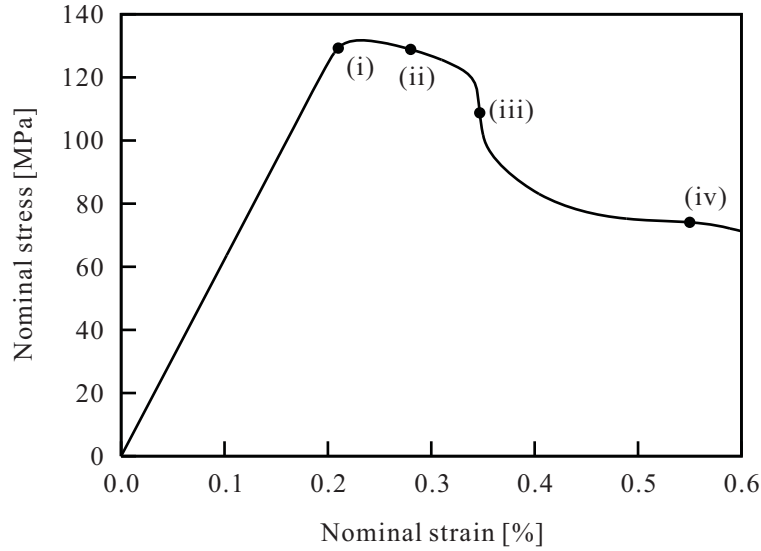
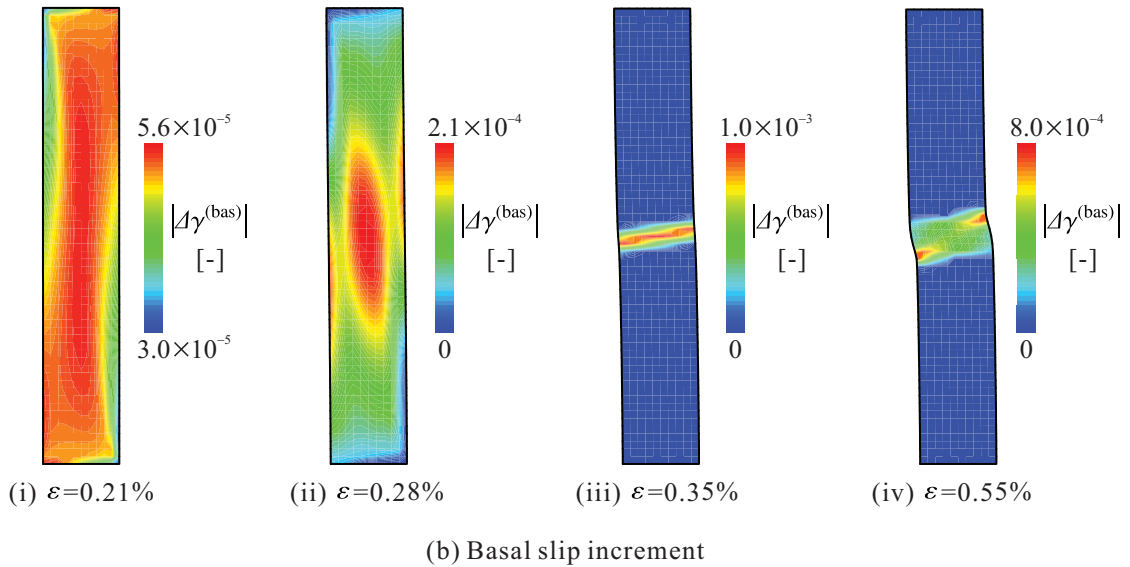
Fig. 7.4 Nominal stress - strain curves with  $\epsilon_s = 0$ .

割で一致している．しかしながら，キック変形後の応力経路はメッシュ分割に依存して大きく異なるものとなっており，従来のモデルではキック変形の FEM 解析にメッシュ依存性が発現することが再確認される．ここで，キック変形の過程を図 7.5 に示す図 7.3(b) のメッシュ分割を用いた解析結果を例にとって述べる．なお，図 7.5(b) は活動が最も支配的な底面系（図 7.2(c) 参照）の図 7.5(a) 中の該当する圧縮率におけるすべり増分分布である．キック変形過程を簡単に述べると，図 7.5(b) に示すように塑性変形初期では試験片全域で底面すべりが生じる．それにともない図 7.5(a) のように公称応力はわずかに緩和される．その後，底面すべり領域は徐々に試験片中央に局所化していき，局所化が十分完了した時点でキック帯が形成され，応力は急激に解放される．なお，本解析では後述するように形成されたキック帯の幅（紙面内で上下方向の幅）は試験片中央のほぼ一要素分となる．その後，負荷とともにキック帯の幅は徐々に拡大していく．

図 7.6～図 7.9 は，それぞれ公称ひずみ  $\epsilon = 1.0\%$  時の最も支配的な底面系のすべり分布，底面の  $z$  軸周りの回転角分布，GN 転位密度の刃状成分分布および SS 転位密度分布である．ここで，すべりは

$$\gamma^{(a)} = \int \dot{\gamma}^{(a)} dt \dots\dots\dots (7.3)$$

により算出している．また，図 7.2(b) に示す初期方位では，同図 (c) の底面系における GN 転位密度のらせん成分は恒等的に零となる．そこで，活動が支配的な底面系の GN 転位密度は刃状成分のみを有するため，以降の GN 転位密度に関する解析結果では刃状成分のみ表示する．また，高次モデルではすべり速度は節点量となるため，すべりおよびすべり速度（増分）分布はコンター表示する．一方，その他の量は積分点量であるため，それらの分布は断らない限り要素ごとにデジタル表示する．図 7.6～図 7.9 より，キック帯における諸量の分布および大きさには顕著なメッシュ依存性が確認できる．また，図 7.6 中にキック帯の幅を大まかに評価して示しており，これらの値から形成したキック帯の幅にもメッシュ依存性が現れ，メッシュ分割を細かくするほどキック帯の幅も小さくなることがわかる．なお，図 7.7 に示すようにキック帯において底面が任意の角

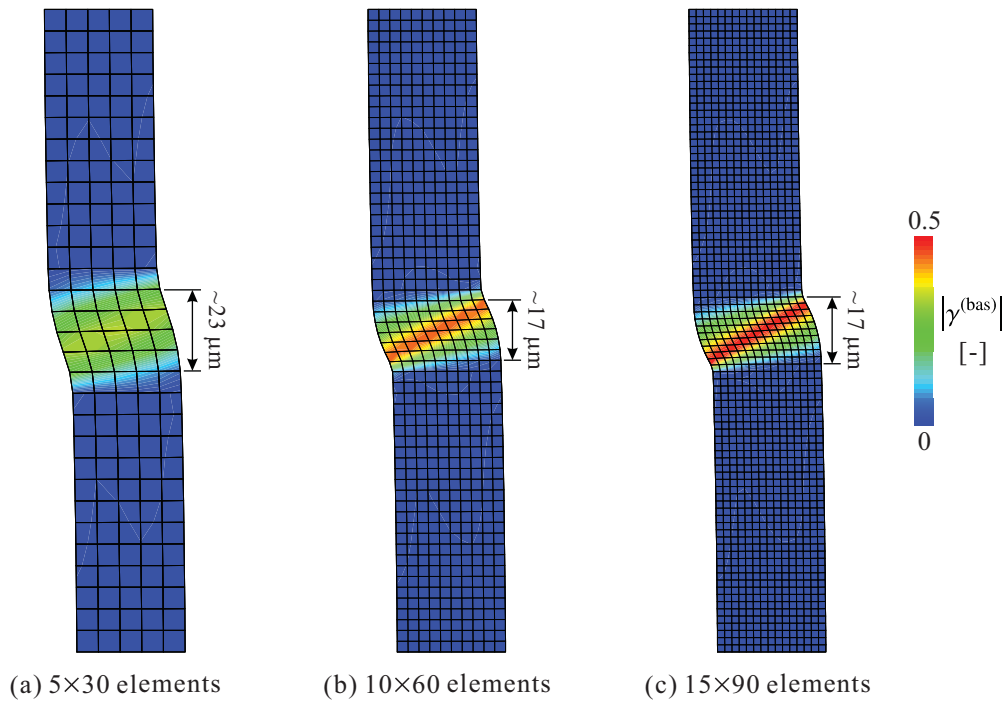
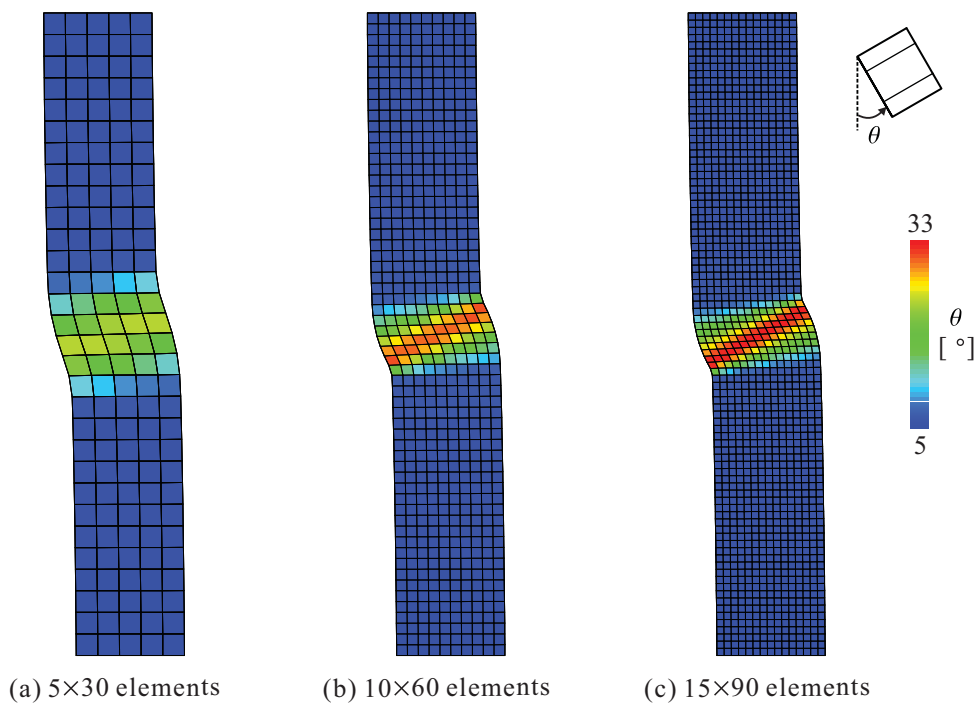
(a) Enlarged view of nominal stress - strain curve with  $10 \times 60$  elements and  $\varepsilon_s = 0$ 

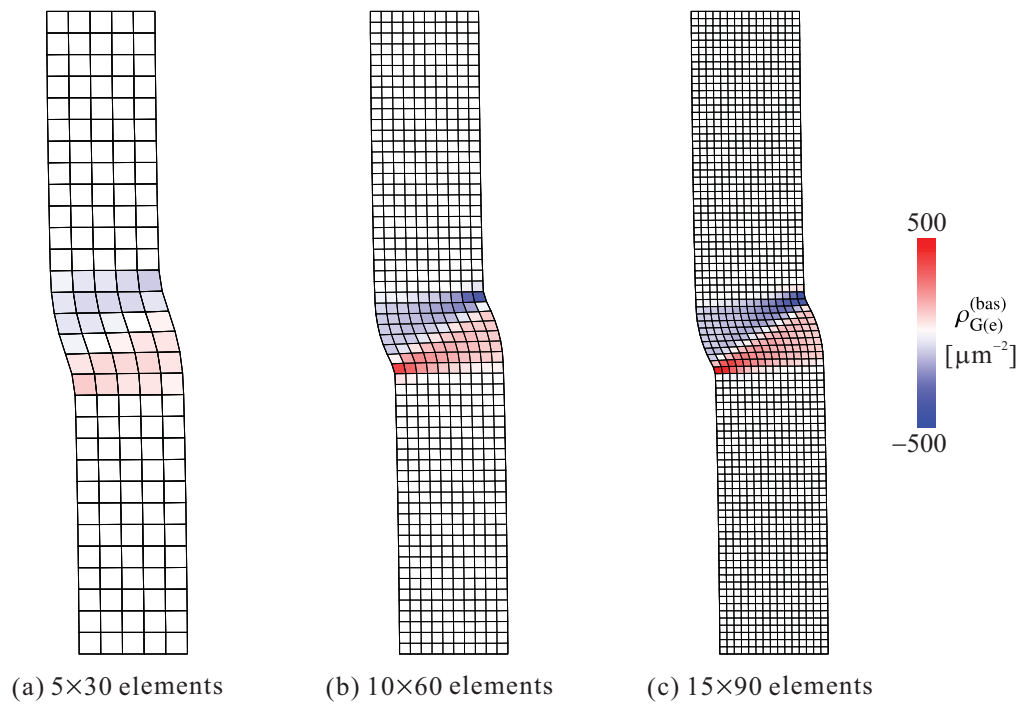
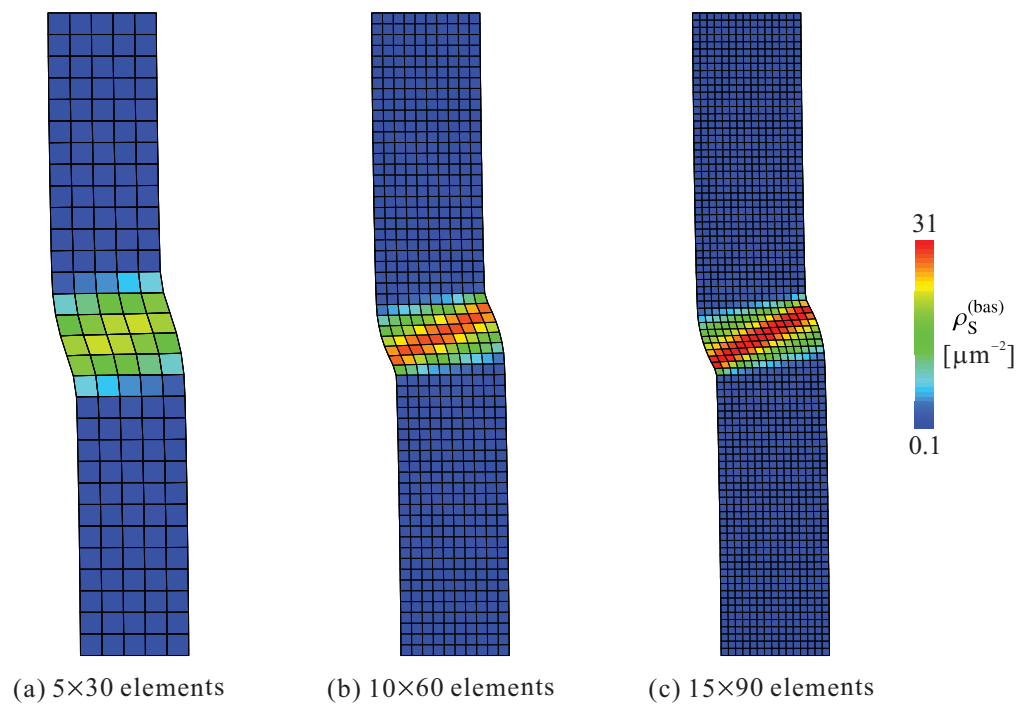
(b) Basal slip increment

Fig. 7.5 Kink band formation in specimen with  $10 \times 60$  elements and  $\varepsilon_s = 0$ .

度回転している様子が確認できる。このことは7.1節で述べた内容と整合しており、解析におけるこのような結晶格子の回転は図7.10に示すようにすべりに起因した塑性スピンにより結晶基底が回転することで生じる。また、図7.11は図7.8(c)および図7.9(c)のキंक帯周辺を拡大したものであり、図中の破線は底面の配向を表している。同図より、この領域では異符号のGN転位が高密度で蓄積し、またSS転位が対角線上に多数蓄積していることから、この変形帯はキंक帯であると改めて断定できる。

図7.12は、図7.5で述べた底面すべりが十分局所化した際の各メッシュ分割における底面系のす

Fig. 7.6 Basal slip with  $\varepsilon_s = 0$  at  $\varepsilon = 1.0\%$ .Fig. 7.7 Rotation angle of basal plane with  $\varepsilon_s = 0$  at  $\varepsilon = 1.0\%$ .

Fig. 7.8 Edge component of basal GN dislocation density with  $\varepsilon_s = 0$  at  $\varepsilon = 1.0\%$ .Fig. 7.9 Basal SS dislocation density with  $\varepsilon_s = 0$  at  $\varepsilon = 1.0\%$ .

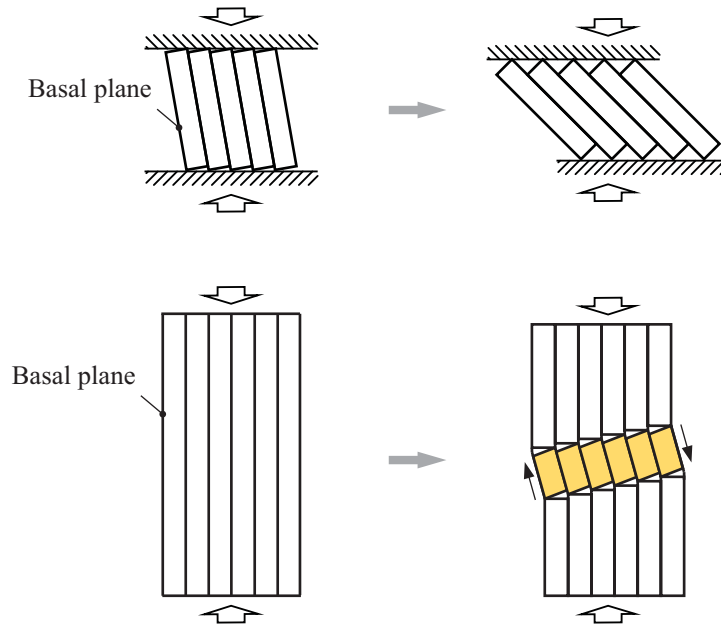
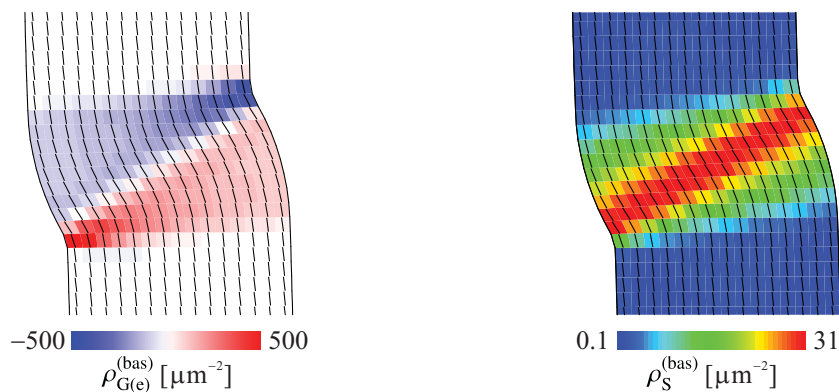


Fig. 7.10 Crystal rotation due to slip.

べり増分分布である。これらの結果から、キंक帯が形成された時点でその幅にメッシュ依存性が現れることがわかる。また、キंक帯において底面すべりが活発に生じている領域の幅は、それぞれのメッシュ分割において試験片中央に位置する一要素分のサイズにほとんど一致している。

なお、図7.4をよくみると、メッシュ分割が細かい場合にはキंक変形中に公称応力が緩やかに波打ち、振動している様子が確認できる。そこで、この現象を検討するために図7.13に $15 \times 90$ メッシュ分割の試験片を用いた図7.4の結果において2度目の応力振動前後の $\varepsilon = 0.5\%$ 付近の底面すべり増分分布を示す。図7.13より、図中に矢印で示すように公称応力の振動前後でキंक帯の幅が上下両側に2要素分拡大していることがわかる。このようなキंक帯の拡大は、拡大前の



(a) Edge component basal GN dislocation density

(b) Basal SS dislocation density

Fig. 7.11 Dislocation density in kink band formed in specimen with  $15 \times 90$  elements and  $\varepsilon_s = 0$  at  $\varepsilon = 1.0\%$ . Dashed lines represent basal plane.

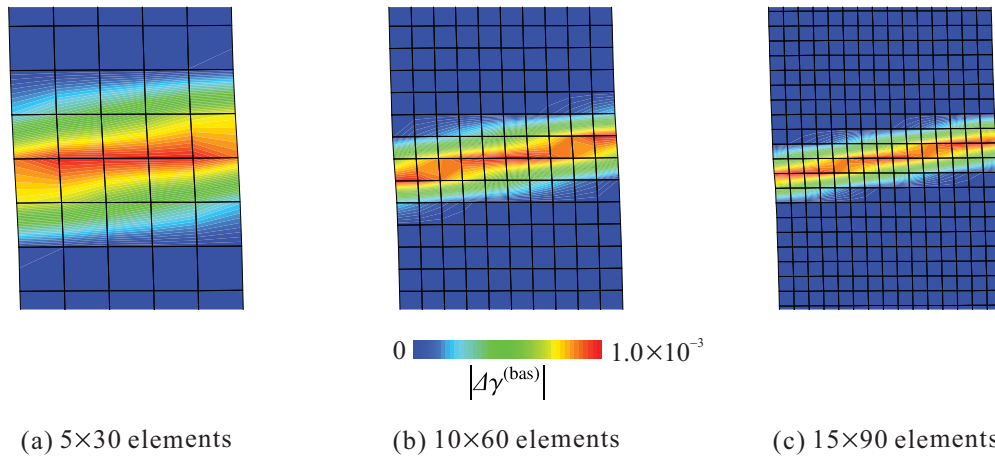


Fig. 7.12 Mesh dependence of width of kink band on early deformation stage with  $\varepsilon_s = 0$  ( $\varepsilon = 0.35\%$ ).

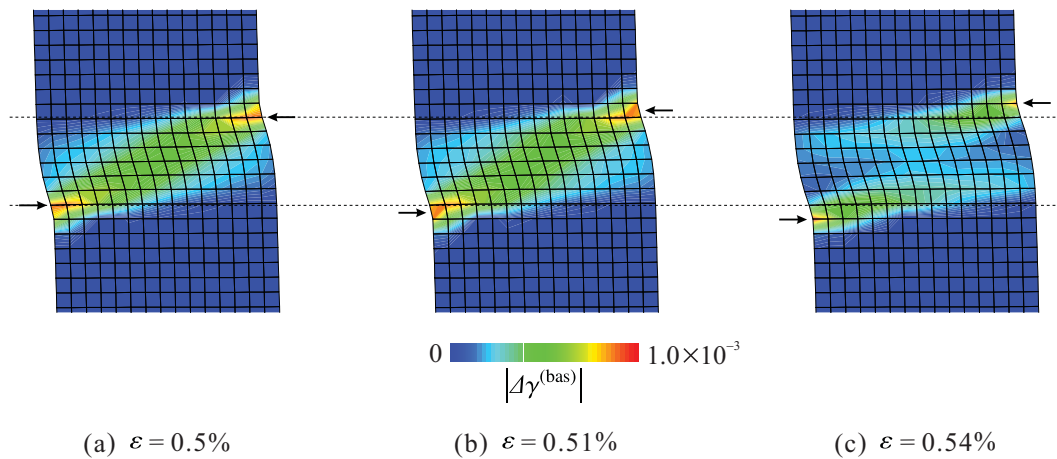


Fig. 7.13 Evolution of kink band in specimen with  $15 \times 90$  elements and  $\varepsilon_s = 0$ .

キンク帯において加工硬化が十分生じ、その後の負荷に対して応力を緩和するために発生すると考えられる。すなわち、キンク帯の拡大直前における加工硬化と拡大直後における応力の緩和によって公称応力-ひずみ線図上に振動が現れたものと考えられる。

以上より、高次応力を考慮しない場合には、キンク帯形成における公称応力-ひずみ線図、形成するキンク帯の幅およびすべり、転位密度等の諸量の分布・大きさにメッシュ依存性が確認される。続いて、次項目より特性長  $r$  を有限とし、高次応力を考慮した場合の解析結果を  $r$  の大きさに従って順次示していく。その際、図 7.7 の底面の回転角および図 7.9 の SS 転位密度の分布はともに図 7.6 に示すすべり分布とほぼ対応しているため、後の項目における検討では紙面の都合上底面すべり分布および GN 転位密度分布のみ掲載することとする。また、図 7.2(c) で示した底面系以外のすべり系の活動は、本項目の解析も含めて 1.0% 圧縮までにはほとんど発生しないことを述べておく。



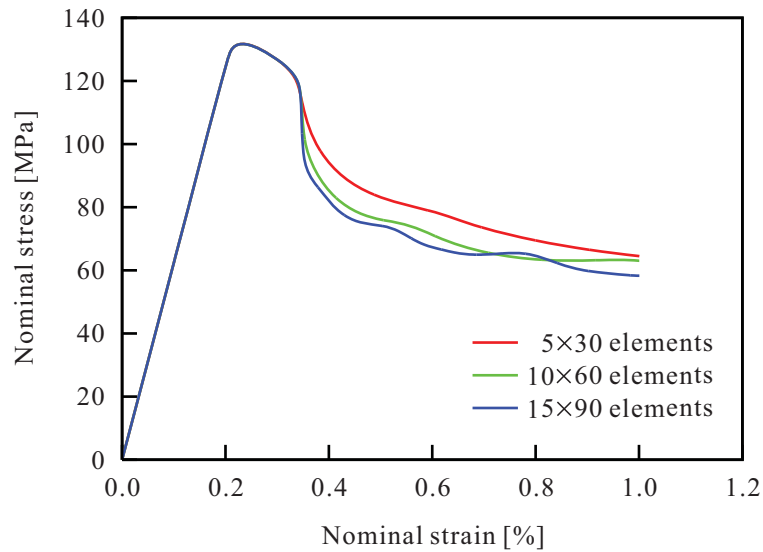
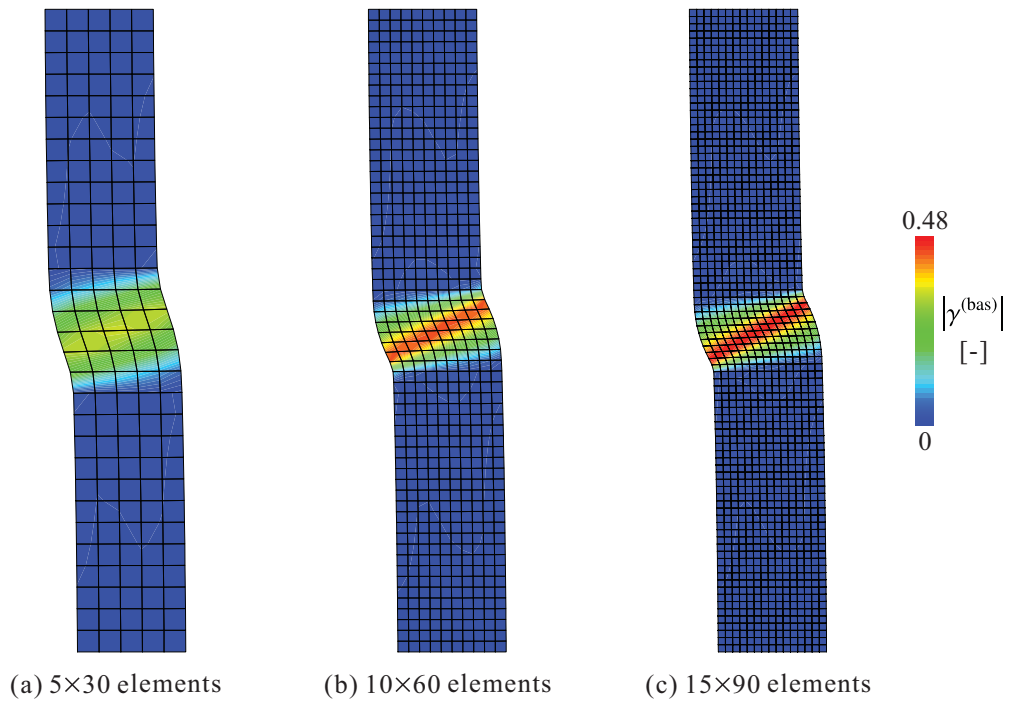
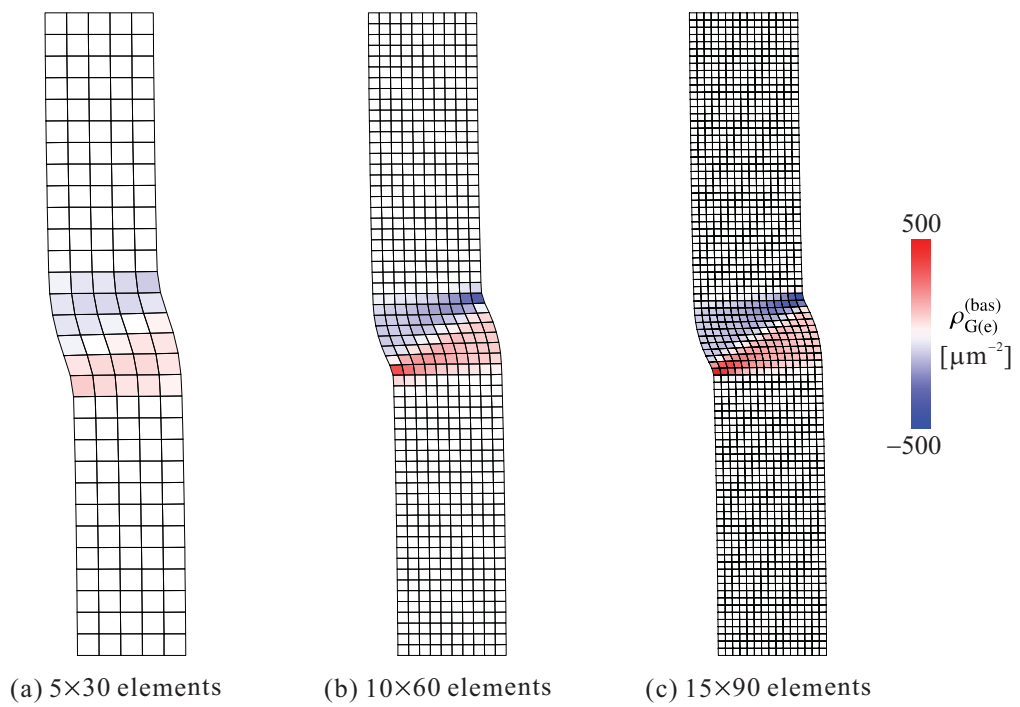


Fig. 7.14 Nominal stress - strain curves with  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-4}$  ( $r = 0.1 \mu\text{m}$ ).

(b)  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-4}$  ( $r = 0.1 \mu\text{m}$ ) の場合

特性長  $r = 0.1 \mu\text{m}$  とした場合，すなわちスケール比にして  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-4}$  であり，モデルに高次応力を導入した場合の解析結果を示す．図 7.14 は公称応力-ひずみ線図であり，前項目の  $\varepsilon_s = 0$  の場合と同様にメッシュ依存性が確認できる．しかしながら，前項目の図 7.4 と比較するとキンク帯形成後のメッシュ分割に依存した応力経路の差は小さくなっており，わずかではあるがメッシュ依存性が軽減されている．また，図 7.15 および図 7.16 はそれぞれ底面系のすべり分布および GN 転位密度の刃状成分分布である．これらの結果をみると，各量の分布にはまだ大きなメッシュ依存性が現れている．ここで，特性長  $r$  は式 (4.28) のように高次応力に含まれる数値係数となる．したがって， $r$  の値が小さいほど高次応力も小さなものとなり，変形に対する材料応答に高次応力が与える影響はわずかなものになると考えられる．すなわち，高次応力が導入されても特性長が小さすぎる場合には，得られる結果は従来のモデルを用いたものと大きな差はないことが確認できる．

Fig. 7.15 Basal slip with  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-4}$  ( $r = 0.1 \mu\text{m}$ ) at  $\varepsilon = 1.0\%$ .Fig. 7.16 Edge component of basal GN dislocation density with  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-4}$  ( $r = 0.1 \mu\text{m}$ ) at  $\varepsilon = 1.0\%$ .

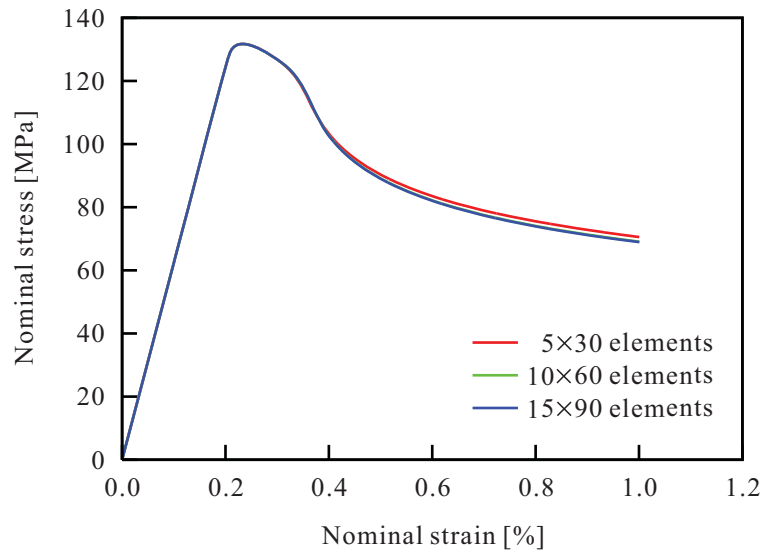
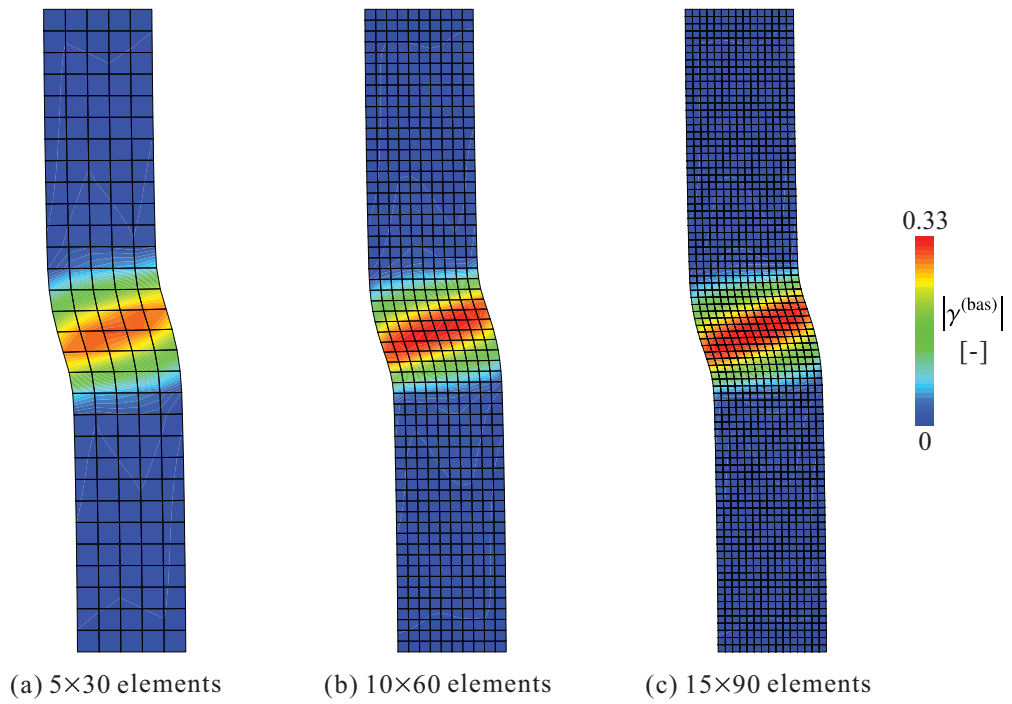
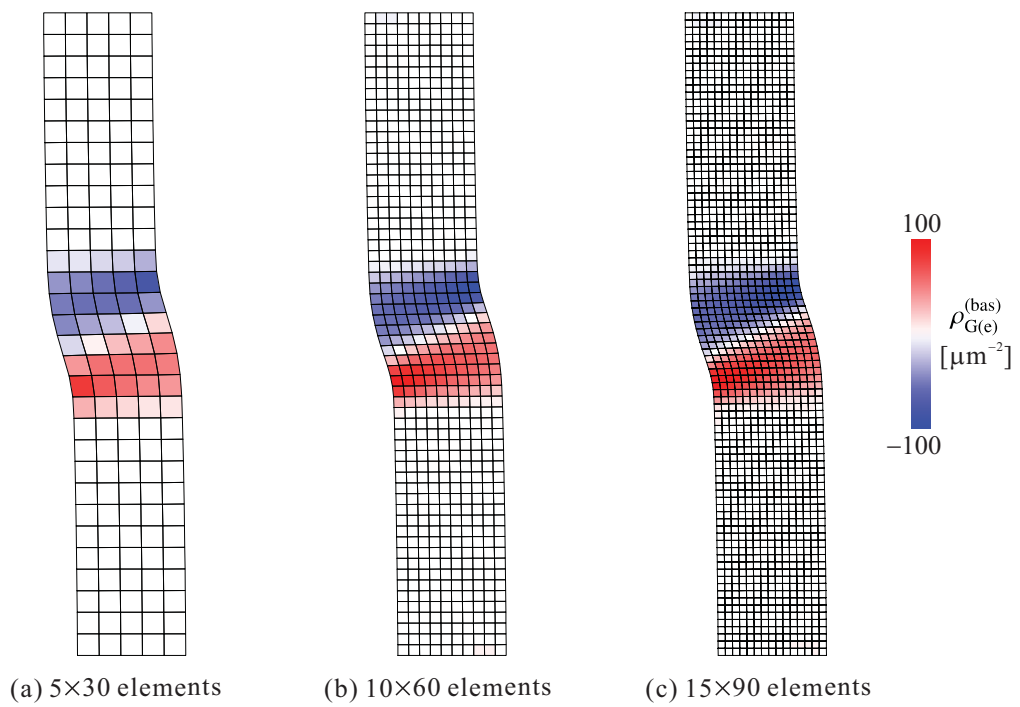


Fig. 7.17 Nominal stress - strain curves with  $\varepsilon_s = 2.8 \times 10^{-3}$  ( $r = 0.5 \mu\text{m}$ ).

(c)  $\varepsilon_s = 2.8 \times 10^{-3}$  ( $r = 0.5 \mu\text{m}$ ) の場合

特性長  $r = 0.5 \mu\text{m}$  とした場合，すなわちスケール比にして  $\varepsilon_s = 2.8 \times 10^{-3}$  の解析結果を示す．図 7.17 はこの場合の公称応力-ひずみ線図であり，前項目までの結果と比較してメッシュ依存性は大幅に軽減されていることがわかる．特にメッシュ分割数を  $10 \times 60$  分割および  $15 \times 90$  分割とした場合の線図はほとんど一致している．また，図 7.18 および図 7.19 はそれぞれ底面系のすべり分布および GN 転位密度の刃状成分分布である．これらの結果から，応力-ひずみ線図と同様に  $10 \times 60$  分割および  $15 \times 90$  分割における各量の分布および大きさはほとんど一致しておりメッシュ依存性はみられない．しかしながら， $5 \times 30$  分割のようにメッシュ分割が粗い場合には，細かなメッシュ分割の結果と比較してわずかではあるが諸量の大きさにメッシュ依存性がみられる．したがって，ある程度細かなメッシュ分割を用いた場合には，スケール比が  $\varepsilon_s \sim 2.8 \times 10^{-3}$  と非常に小さな場合にも解析結果のメッシュ依存性はほぼ取り除かれることがわかる．

Fig. 7.18 Basal slip with  $\varepsilon_s = 2.8 \times 10^{-3}$  ( $r = 0.5 \mu\text{m}$ ) at  $\varepsilon = 1.0\%$ .Fig. 7.19 Edge component of basal GN dislocation density with  $\varepsilon_s = 2.8 \times 10^{-3}$  ( $r = 0.5 \mu\text{m}$ ) at  $\varepsilon = 1.0\%$ .

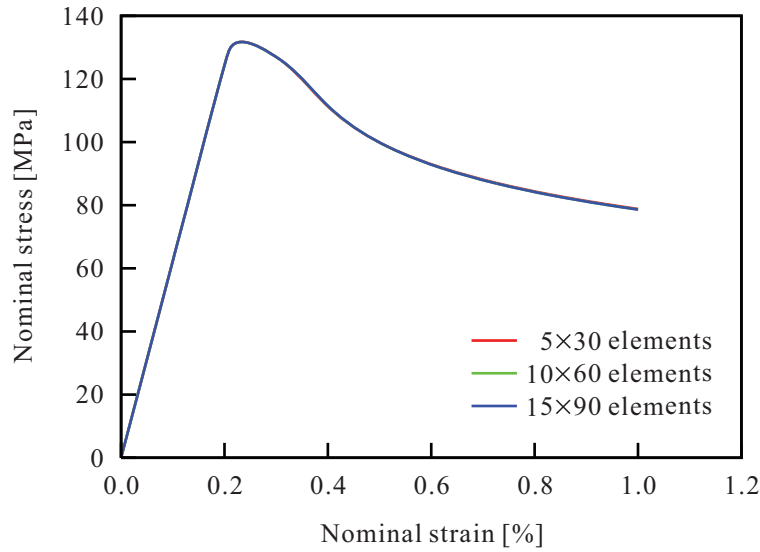
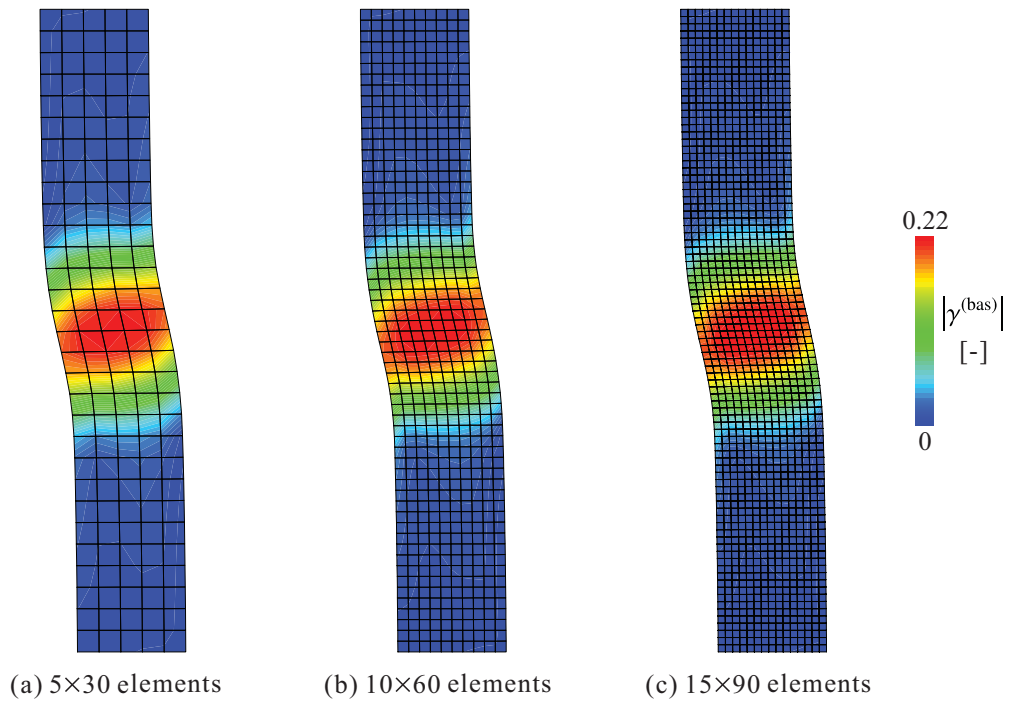
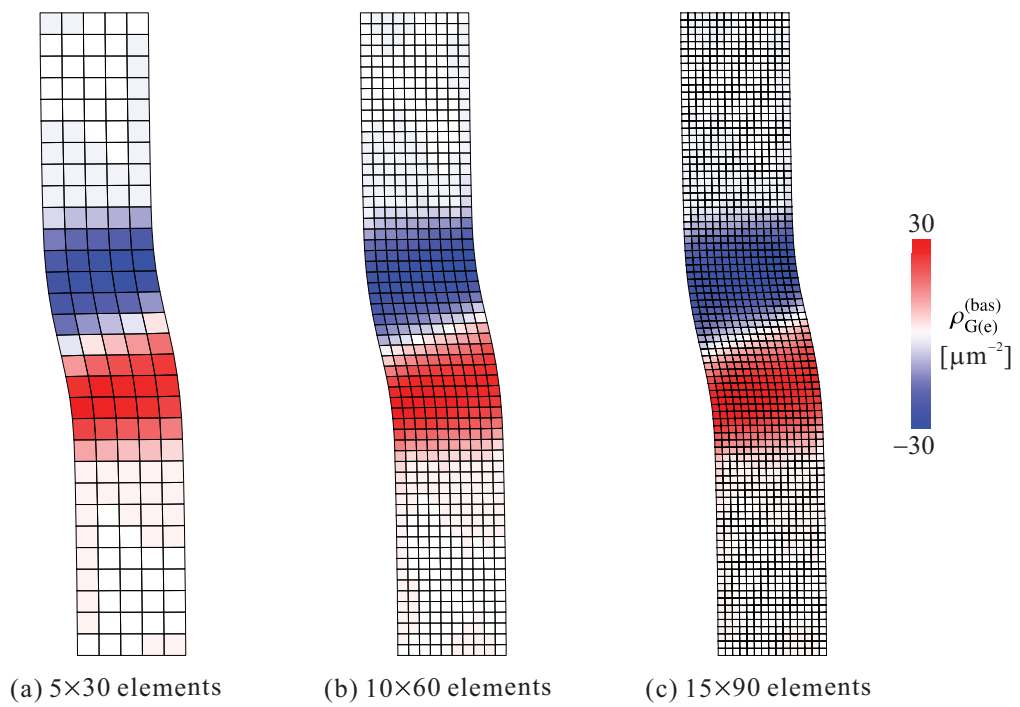


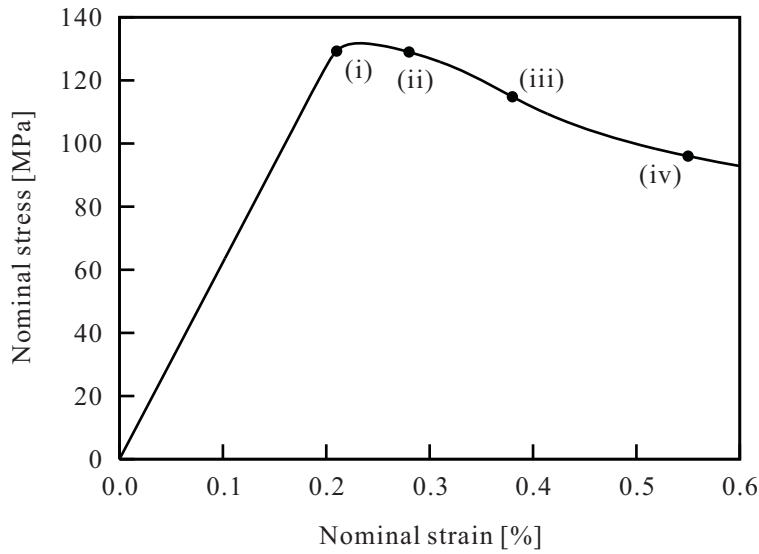
Fig. 7.20 Nominal stress - strain curves with  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$  ( $r = 1.0 \mu\text{m}$ ).

(d)  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$  ( $r = 1.0 \mu\text{m}$ ) の場合

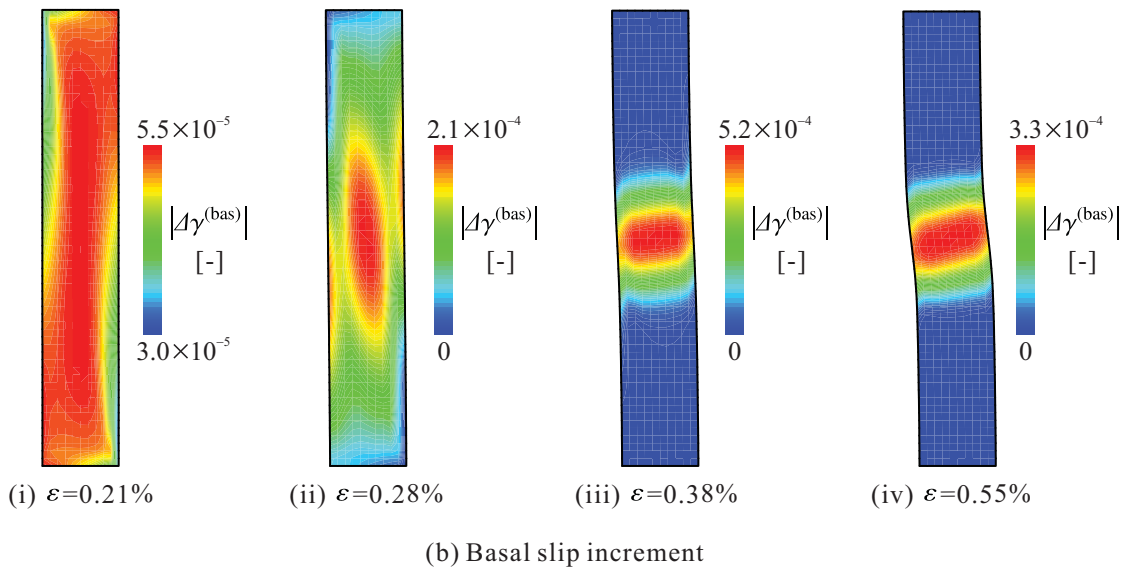
特性長  $r = 1.0 \mu\text{m}$  とした場合、すなわちスケール比にして  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$  の解析結果を示す。図 7.20 は公称応力-ひずみ線図であり、3種類のメッシュ分割において応力経路はほとんど完全に一致していることがわかる。したがって、この場合の応力-ひずみ線図にはメッシュ依存性は認められない。また、図 7.21 および図 7.22 にそれぞれ示す底面系のすべり分布および GN 転位密度の刃状成分分布においても、各量の分布および大きさに関してメッシュ依存性はほぼ取り除かれている。さらに、図 7.21 および図 7.22 より形成したキンク帯の幅も同じものとなっている。したがって、スケール比が  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$  の場合には、 $5 \times 30$  分割のような粗いメッシュ分割を用いてもキンク変形のメッシュ依存性を取り去ることが可能といえる。なお、 $\varepsilon = 1.0\%$  における形成したキンク帯の幅は、特性長が  $r < 1.0 \mu\text{m}$  の場合のものとは比べて大きくなっていることがわかる。これについては次項にて詳しく述べる。

ここで、本項目の解析におけるキンク帯形成過程を詳細にみていく。図 7.23 は  $10 \times 60$  メッシュ分割を用いた場合の (a) キンク帯形成前後の公称応力-ひずみ線図および (b) 各圧縮率における底面すべり増分分布である。同図より、塑性変形初期では試験片全域で底面すべりが生じ、その後底面すべりが活発に生じる領域は試験片中央に徐々に局所化している様子がみてとれる。この傾向は図 7.5 で示した従来の解析結果と同様である。しかしながら、従来の解析結果とは異なり、底面すべり領域の局所化は試験片中央の一要素まで進むことなく、ある程度の幅をもって完了していることがわかる。また、その後の負荷に対してもキンク帯の幅はほとんど変化せず、最初に形成したキンク帯においてのみ変形が生じている。したがって、従来の解析結果との大きな違いは、従来の結果では一要素分まで局所化したキンク帯がその後の負荷によって幅を拡大するのに対して、本解析結果では最初に形成したキンク帯の幅がその後も維持される点といえる。それにより、項目 (a) および図 7.13 で述べたような応力-ひずみ線図上の振動は本解析ではみられない。また、図 7.24 は各メッシュにおける初期に形成したキンク帯を拡大したものであり、最初に決定される

Fig. 7.21 Basal slip with  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$  ( $r = 1.0 \mu\text{m}$ ) at  $\varepsilon = 1.0\%$ .Fig. 7.22 Edge component of basal GN dislocation density with  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$  ( $r = 1.0 \mu\text{m}$ ) at  $\varepsilon = 1.0\%$ .



(a) Enlarged view of nominal stress - strain curve with  $10 \times 60$  elements and  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$



(i)  $\varepsilon=0.21\%$

(ii)  $\varepsilon=0.28\%$

(iii)  $\varepsilon=0.38\%$

(iv)  $\varepsilon=0.55\%$

(b) Basal slip increment

Fig. 7.23 Kink band formation in specimen with  $10 \times 60$  elements and  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$ .

キンク帯の幅はメッシュ分割に依存しないことが確認できる。そのキンク帯の幅は、おおまかに見積もれば  $24 \mu\text{m}$  程度であり、図 7.6 に示す  $r = 0$  かつ  $\varepsilon = 1.0\%$  後のキンク帯の幅と比べて大きな値となっている。

図 7.25 は、 $\varepsilon = 1.0\%$  におけるキンク帯周辺の (a)GN 転位密度の刃状成分分布、(b)SS 転位密度分布および (c)底面の  $z$  軸周りの回転角分布である。また、同図 (a) および (b) に示す破線は底面の配向を表している。同図と図 7.11 を比較すると、キンク帯の幅が拡大することにより、キンク帯において諸量はより滑らかに分布していることがわかる。

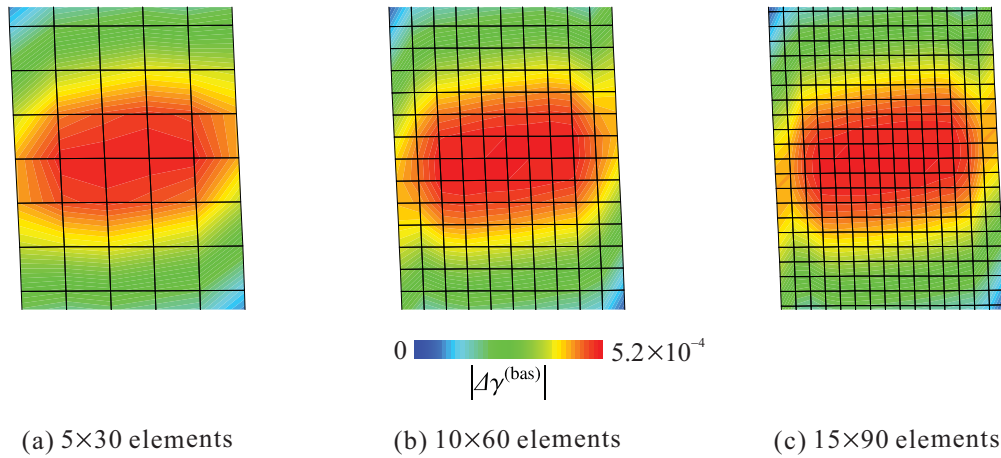


Fig. 7.24 Mesh dependence of width of kink band on early deformation stage with  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$  ( $\varepsilon = 0.38\%$ ).

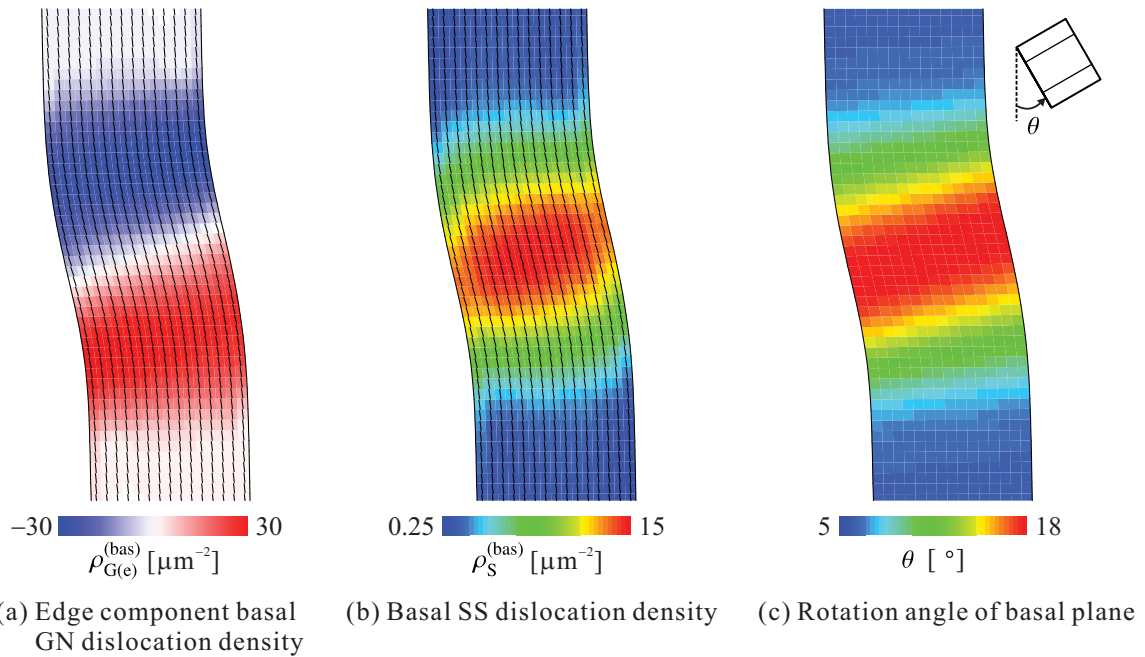


Fig. 7.25 Dislocation density and rotation angle of basal plane in kink band formed in specimen with  $15 \times 90$  elements and  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$  at  $\varepsilon = 1.0\%$ . Dashed lines represent basal plane.

なお、本項目の解析においてはメッシュ分割をさらに粗くして  $3 \times 18$  分割とした場合の解析も行った。その公称応力-ひずみ線図およびすべり分布等の解析結果は、図 7.20～図 7.24 と比較すればメッシュ依存性が見受けられたが、その差は極わずかであることも述べておく。



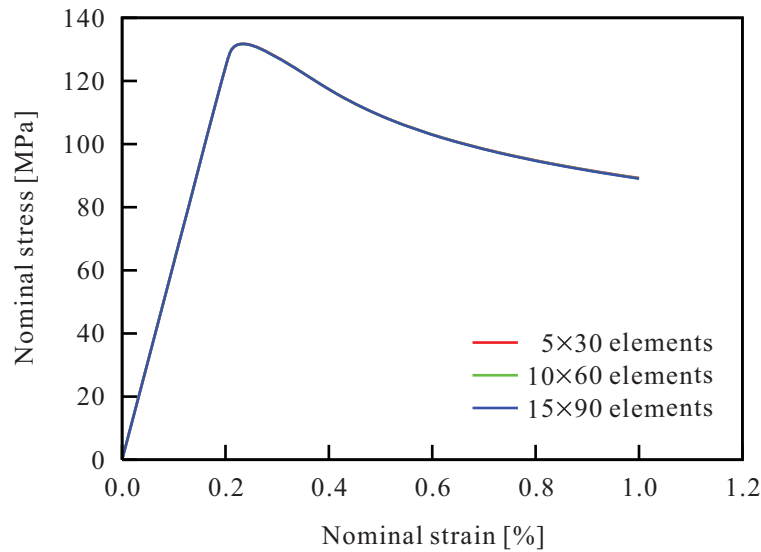
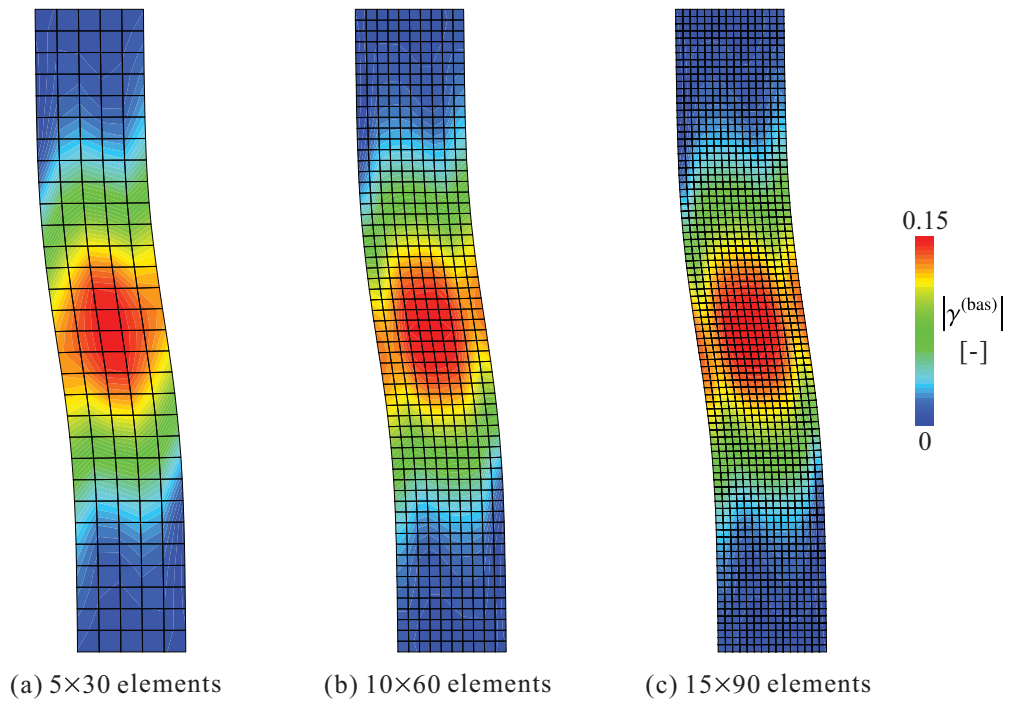
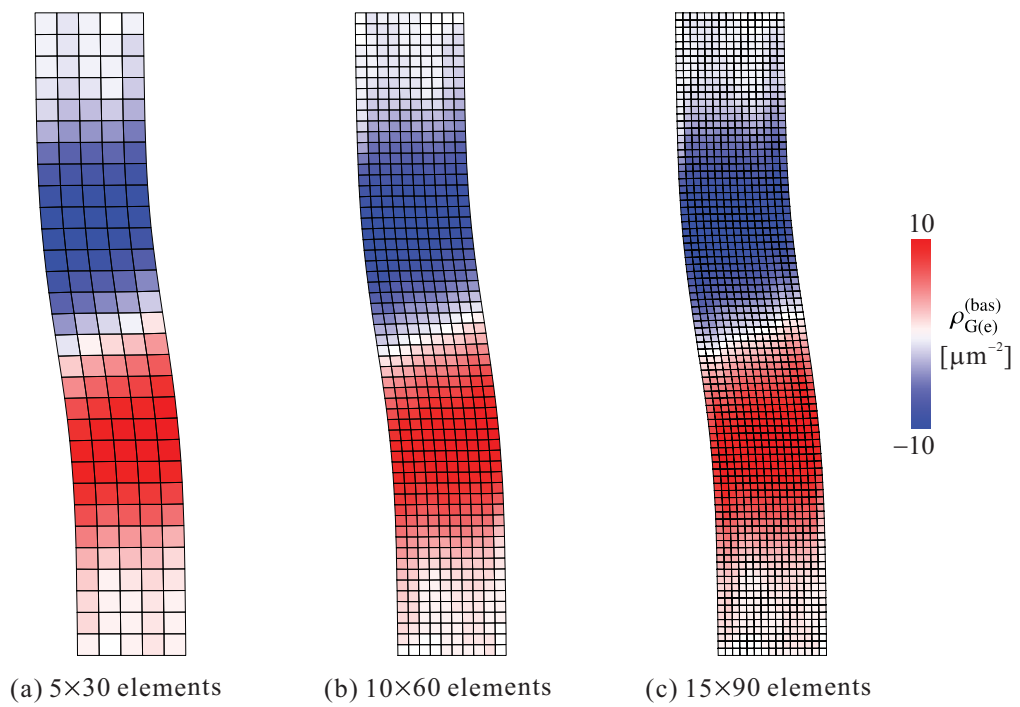


Fig. 7.26 Nominal stress - strain curves with  $\varepsilon_s = 1.1 \times 10^{-2}$  ( $r = 2.0 \mu\text{m}$ ).

(e)  $\varepsilon_s = 1.1 \times 10^{-2}$  ( $r = 2.0 \mu\text{m}$ ) の場合

特性長  $r = 2.0 \mu\text{m}$  とした場合，すなわちスケール比にして  $\varepsilon_s = 1.1 \times 10^{-2}$  の解析結果を示す．図 7.26 は公称応力-ひずみ線図であり，本解析においても前項目の結果と同様に 3 種類のメッシュ分割で応力経路は完全に一致していることがわかる．また，図 7.27 および図 7.28 にそれぞれ示す底面系のすべり分布および GN 転位密度の刃状成分分布もその分布および大きさに関してメッシュ依存性はみられない．さらに，形成したキンク帯の幅も各メッシュ分割で一致していることがわかる．なお，キンク帯の幅は前項目までの結果と比較して非常に大きなものとなっている．このような大きな幅を有するキンク帯は，図 7.24 と同様に初期に大きなキンク帯が形成することにより生じたものである．

以上の結果より， $H = 180 \mu\text{m}$  の試験片に対して特性長を  $r \geq 1.0 \mu\text{m}$ ，すなわちスケール比を  $\varepsilon_s \geq 5.6 \times 10^{-3}$  とすれば，本解析で用いた 3 通りのメッシュ分割に対してキンク帯形成のメッシュ依存性は取り除かれるといえる．なお，本項の全ての解析では 9 節点四辺形要素を使用しているが，その他の要素を用いた場合のメッシュ依存性に関しては補足 D.1 を参照されたい．また，6.3 節および補足 C.1 で述べた本高次モデルの別解法を用いた解析を補足 D.2 に簡単に示す．

Fig. 7.27 Basal slip with  $\varepsilon_s = 1.1 \times 10^{-2}$  ( $r = 2.0 \mu\text{m}$ ) at  $\varepsilon = 1.0\%$ .Fig. 7.28 Edge component of basal GN dislocation density with  $\varepsilon_s = 1.1 \times 10^{-2}$  ( $r = 2.0 \mu\text{m}$ ) at  $\varepsilon = 1.0\%$ .

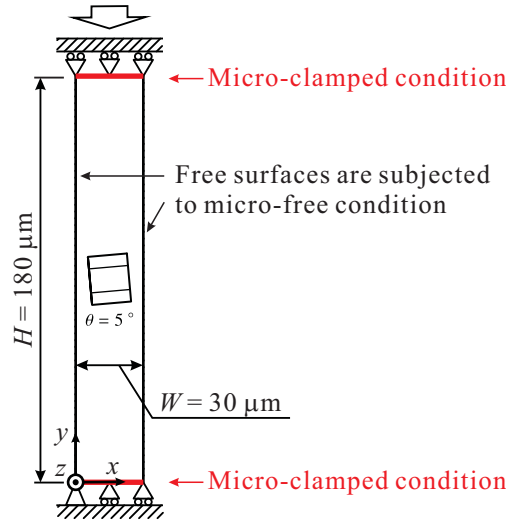


Fig. 7.29 Boundary condition appropriate for higher-order theory.

7.2.2 キンク帯形成におけるスケール比の影響

前項ではキンク帯形成におけるメッシュ依存性の除去に最低限必要なスケール比  $\epsilon_s$  を示した。そこで本項では、スケール比を有限かつより大きな範囲で変動させた場合の解析を実施し、スケール比ならびに特性長がキンク帯形成に及ぼす影響を検討する。また、特性長比  $\epsilon_l$  の変形への寄与について考察する。

解析対象は図 7.2(a) に示す LPSO 相単結晶とし、初期結晶方位、物性値および数値パラメータも前項と同じく図 7.2(b) および表 7.1 をそれぞれ用いる。また、試験片のメッシュ分割には9節点四辺形要素による図 7.3(b) の  $10 \times 60$  分割を用い、解析に用いる特性長およびスケール比の範囲は前項で確認したようにメッシュ依存性が取り除かれる  $r \geq 1.0 \mu\text{m}$  および  $\epsilon_s \geq 5.6 \times 10^{-3}$  とする。ただし、前項では  $r = 0$  とした従来の解析結果との比較も含んでいたため、高次量の境界条件として式 (7.1) で表される全表面上ですべて自由境界条件を用いていた。しかしながら、高次応力を考慮した解析では、本来は式 (7.1) の境界条件の適用は適切でない。なぜならば、この境界条件は全表面上で GN 転位が完全に抜け切ることを表している一方で、速度 (変位増分) に関する図 7.2(a) に示す境界条件では試験片上下端面は治具等の実験装置に接触すると考えられる。したがって、それらの境界上で GN 転位は運動が阻害され、境界に堆積すると考えられるためである。そこで、本項の解析では高次理論に適する境界条件として以下を用いる。

$$\left. \begin{aligned} \dot{\zeta}^{(\alpha)} &= 0 & \text{at } x = 0, x = W, y \neq 0, y \neq H \\ \dot{\gamma}^{(\alpha)} &= 0 & \text{at } y = 0, y = H \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (7.4)$$

すなわち、図 7.29 に示すように自由表面においてすべて自由境界条件を、試験片上下の変位制御面においてすべて拘束境界条件をそれぞれ適用する。ここで、図 7.30 は前項で適用した式 (7.1) の境界条件 (全表面上ですべて自由) と式 (7.4) および図 7.29 で表される境界条件を用いた場合のそれぞれの解析で得られた公称応力-ひずみ線図である。同図より、これらの境界条件の違いによる変

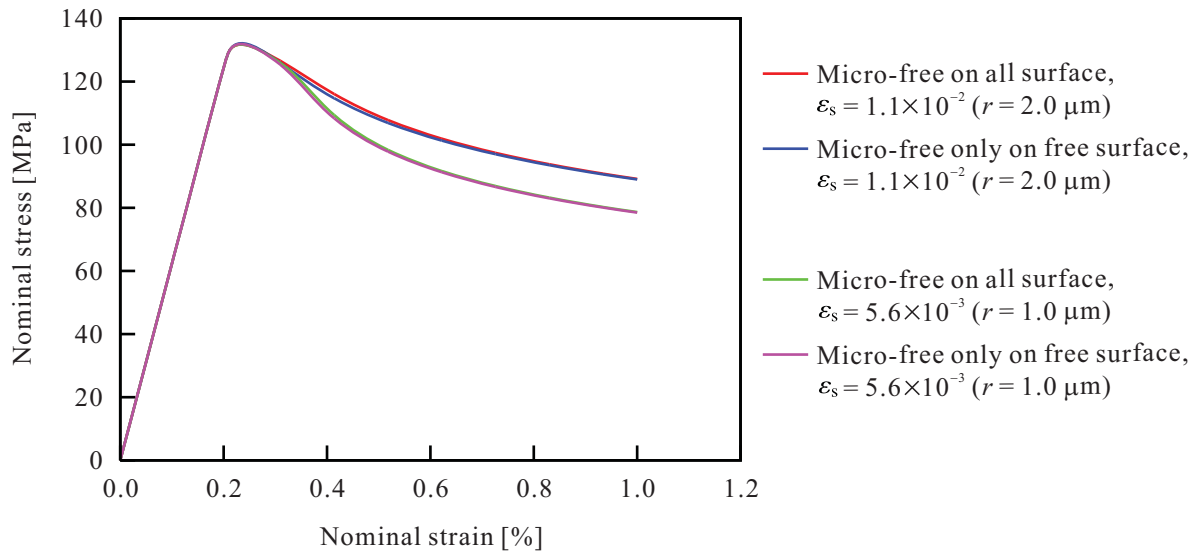


Fig. 7.30 Effect of boundary condition for slip rate on nominal stress - strain curves.

形への影響は極めて小さいことがわかる．これは，これらの解析ではキンク変形が試験片中央部といういま境界条件の違いを考えている試験片上下端面から離れた部位において発生するため，いわゆるサンブナンの原理に従って変形に対する境界条件の寄与が小さいためである．ただし，全てのスケール比においてキンク変形が試験片中央部のみで発生するとは限らないため，上述のような実験的な整合性から本項以降の全ての解析で高次量の境界条件には式(7.4)の条件を適用するものとする．

まず，変形に対する特性長ならびにスケール比の影響を検討するために，特性長比を  $\epsilon_1 = 0.1$  で固定して解析を行う．図 7.31 は，特性長  $r$  およびスケール比  $\epsilon_s$  を様々な値に変化させた解析により得られた公称応力-ひずみ線図である．同図より，スケール比が大きくなるにつれてキンク変形にともなう応力降下の程度は小さくなっていることがわかる．また，スケール比が  $\epsilon_s \geq 5.6 \times 10^{-2}$  では応力降下は起きず，反対に顕著な加工硬化が生じている．図 7.32 および図 7.33 は，それぞれ各スケール比に対応する 1.0% 圧縮後の底面すべり分布および GN 転位密度の刃状成分分布である．これらの図から，スケール比が大きくなるにつれて形成するキンク帯の幅も大きくなっている様子がうかがえる．また，それにともない各量は連続的で滑らかな分布となり，すべり値および GN 転位密度値の最大値も小さくなっている．また， $\epsilon_s = 2.2 \times 10^{-2}$  程度でキンク帯の幅は試験片の長辺にほぼ一致し，それ以上スケール比を大きくとっても試験片の変形後の外形には大きな違いがみられない．さらに，スケール比の小さい  $\epsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$  および  $\epsilon_s = 1.1 \times 10^{-2}$  を比較すれば，特性長およびスケール比が倍になればキンク帯のおおよその幅もほぼ倍になっていることがわかる．したがって，特性長ならびにスケール比がキンク帯の幅を決定する要因であると考えられる．なお， $\epsilon_s \geq 2.2 \times 10^{-2}$  の場合には，試験片上下端面からわずかに離れた領域においても底面すべりが活発に生じている．このような場合には，試験片上下端面に課した図 7.29 に示すすべりに対する境界条件の影響が大きく現れると考えられる．

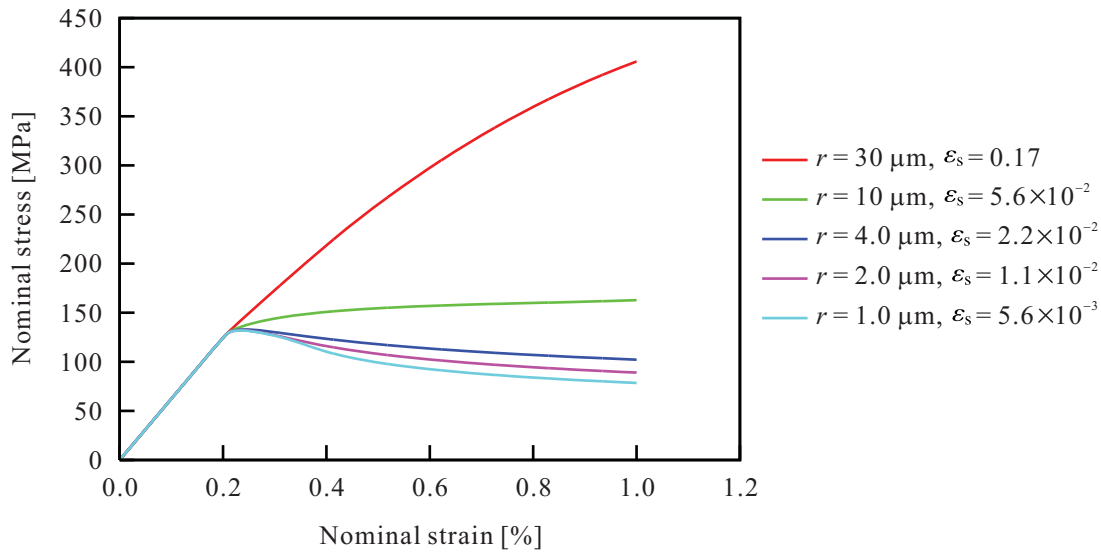
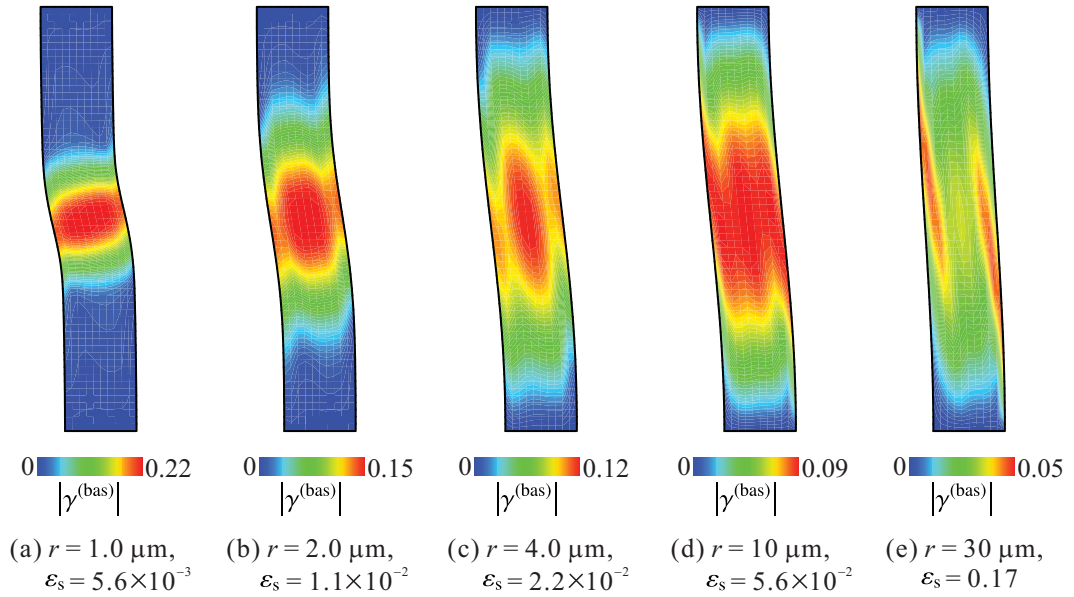
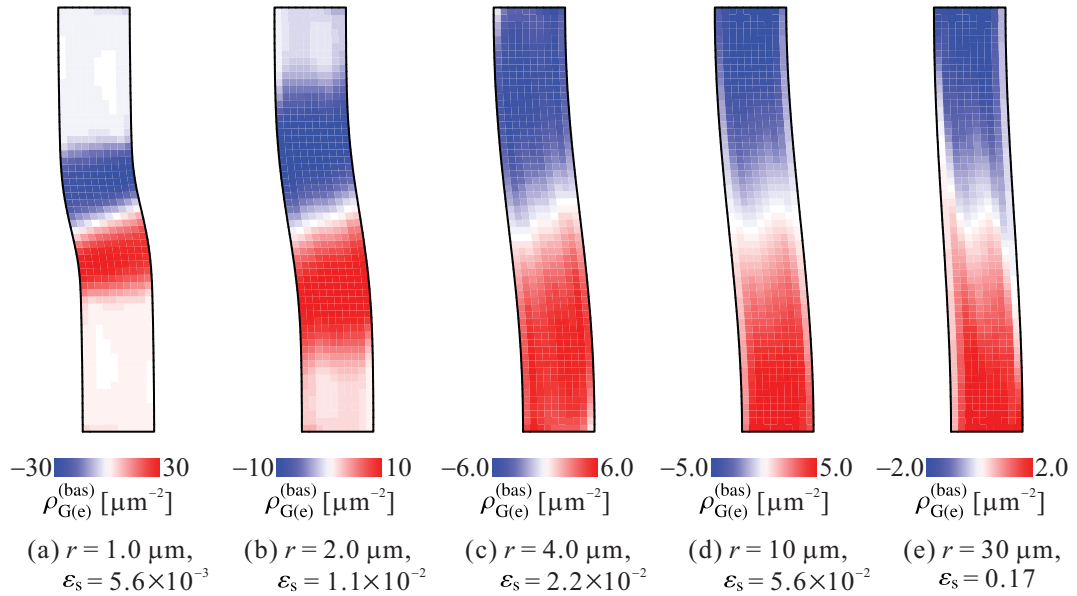


Fig. 7.31 Dependence of scale ratio of nominal stress - strain curves.

図 7.34 は、 $r = 10 \mu\text{m}$  および  $\epsilon_s = 5.6 \times 10^{-2}$  とした場合の式 (7.4) および前項で用いた式 (7.1) の境界条件の違いによる応力-ひずみ線図の差異を表したものである。繰返しとなるが、これら 2 つの境界条件では試験片上下端面におけるすべり速度に対する境界条件が異なる。図 7.30 にて述べた変形では、その全てが試験片中央付近で発生したのに対して、図 7.32(d) に示す  $\epsilon_s = 5.6 \times 10^{-2}$  の解析結果では試験片上下端面近傍においても塑性変形が活発に生じている。この場合には、式 (7.4)<sub>2</sub> のすべり拘束条件のために試験片上下端面において GN 転位は堆積し、その箇所では顕著な加工硬化が生じる。一方、試験片全表面に対して式 (7.1) の境界条件を適用した際には、図 5.1(b) に示すように GN 転位は材料外部に完全に抜け切ることができるため加工硬化は生じないと考えられる。図 7.35 は、この状況に対応する  $r = 10 \mu\text{m}$  および  $\epsilon_s = 5.6 \times 10^{-2}$  かつ境界条件に式 (7.1) を用いた際のすべり分布および GN 転位密度分布であり、実際に試験片上下端面において底面すべりが活発に生じ、その部位における GN 転位密度は値をほとんど有していないことがわかる。このような GN 転位の堆積と関連した境界条件の違いが図 7.34 における 2 つの結果の差を生じたと考えられる。したがって、高次理論において新たに導入されるすべり速度の境界条件は、塑性変形が試験片で全体的に生じる場合に変形に大きな影響を与えることがわかる。また、この境界条件を精密に与えることで、実験条件をより正確に模擬した解析を行うことが可能と考えられる。

続いて、特性長比  $\epsilon_l$  の影響を検討するために、特性長およびスケール比をそれぞれ  $r = 1.0 \mu\text{m}$  および  $\epsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$  で固定して解析を行う。図 7.36 は、特性長比  $\epsilon_l$  を様々な値に変化させた解析により得られた公称応力-ひずみ線図である。同図をみると全ての線図は一致しており、 $\epsilon_l$  を 100 倍程度変化させても解析結果には差はみられない。ここで、微視的特性長  $l$  は式 (4.39)、式 (4.42) および式 (4.43) により硬化則に導入されるため、SS 転位密度が微視的特性長および特性長比の影響を最も受けると考えられる。そこで、図 7.37 に 1.0% 圧縮後の底面系の SS 転位密度分布を示す。図 7.37 より、特性長比を変化させても SS 転位密度の分布はほとんど変わらない。ただし、各図の右側に挿入したスケールバーに示すように SS 転位密度の最大値および最小値にはわずかな差はある。

Fig. 7.32 Dependence of scale ratio of basal slip at  $\varepsilon = 1.0\%$ .Fig. 7.33 Dependence of scale ratio of edge component of basal GN dislocation density at  $\varepsilon = 1.0\%$ .

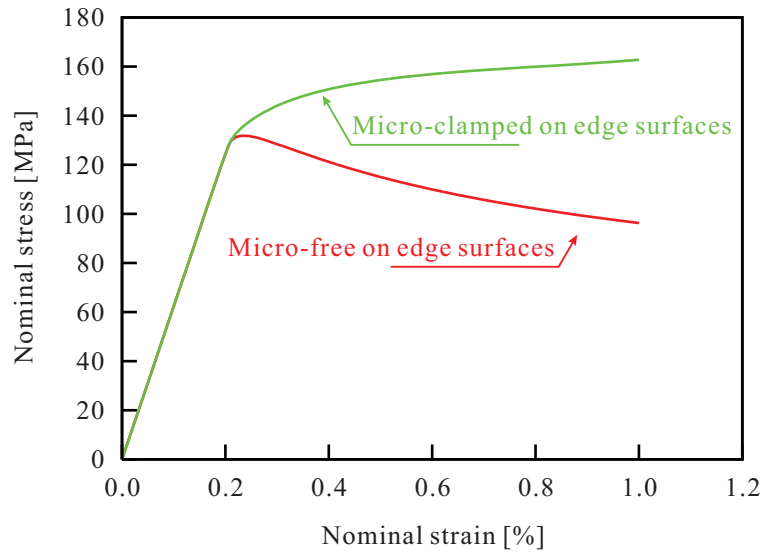


Fig. 7.34 Effect of boundary condition for slip rate on nominal stress - strain curves ( $r = 10 \mu\text{m}$ ,  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-2}$ ).

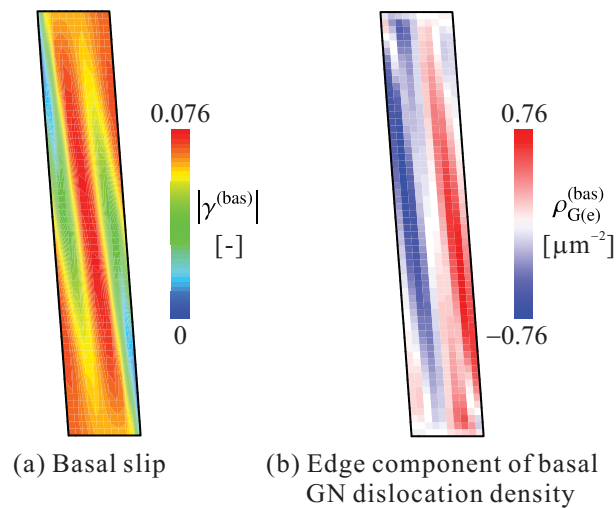


Fig. 7.35 Distributions of each value with micro-free condition for all surface ( $r = 10 \mu\text{m}$ ,  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-2}$ ). This boundary condition is represented by eq. (7.1).

が変化が生じていることがわかる。しかしながら、その変化は特性長比を 100 倍のオーダーで変化させても極めて小さなものであり、SS 転位密度は特性長比に鈍感であるといえる。同様の結果は、図 7.38 および図 7.39 に示すようにその他の特性長ならびにスケール比を用いた場合にも認められる。したがって、特性長比  $\varepsilon_l$  および微視的特性長  $l$  がキンク帯形成に及ぼす影響は極めて小さいといえる。

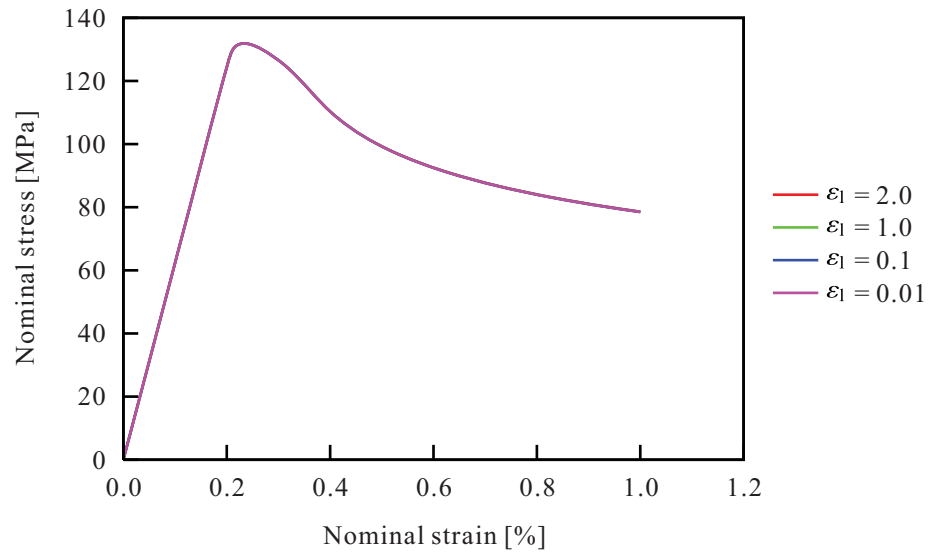


Fig. 7.36 Dependence of length scale ratio of nominal stress - strain curves ( $r = 1.0 \mu\text{m}$ ,  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$ ).

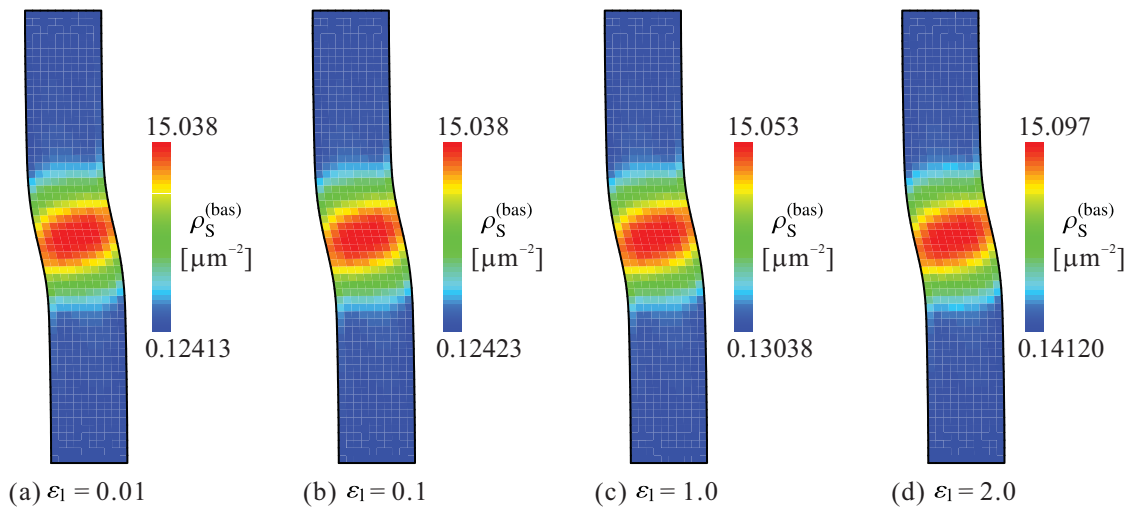


Fig. 7.37 Effect of length scale ratio on basal SS dislocation density at  $\varepsilon = 1.0\%$  ( $r = 1.0 \mu\text{m}$ ,  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$ ).



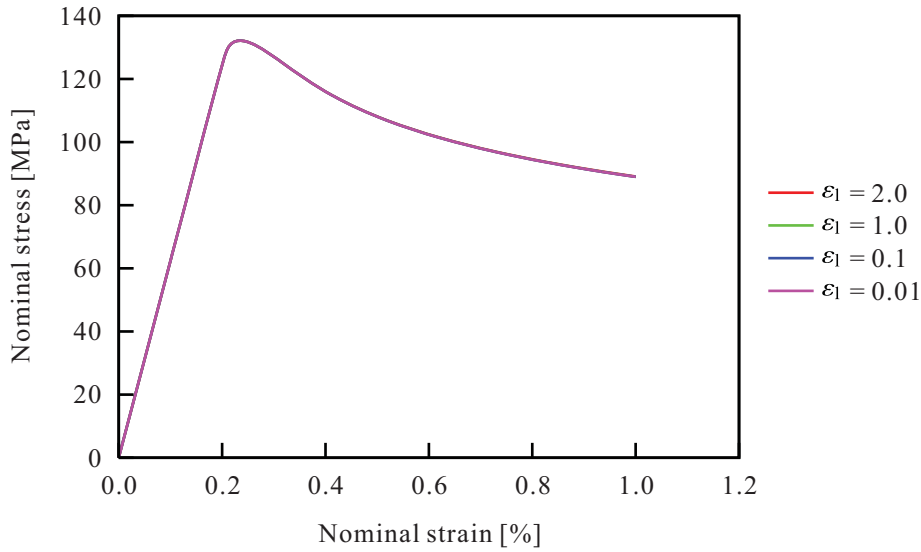


Fig. 7.38 Dependence of length scale ratio of nominal stress - strain curves ( $r = 2.0 \mu\text{m}$ ,  $\varepsilon_s = 1.1 \times 10^{-2}$ ).

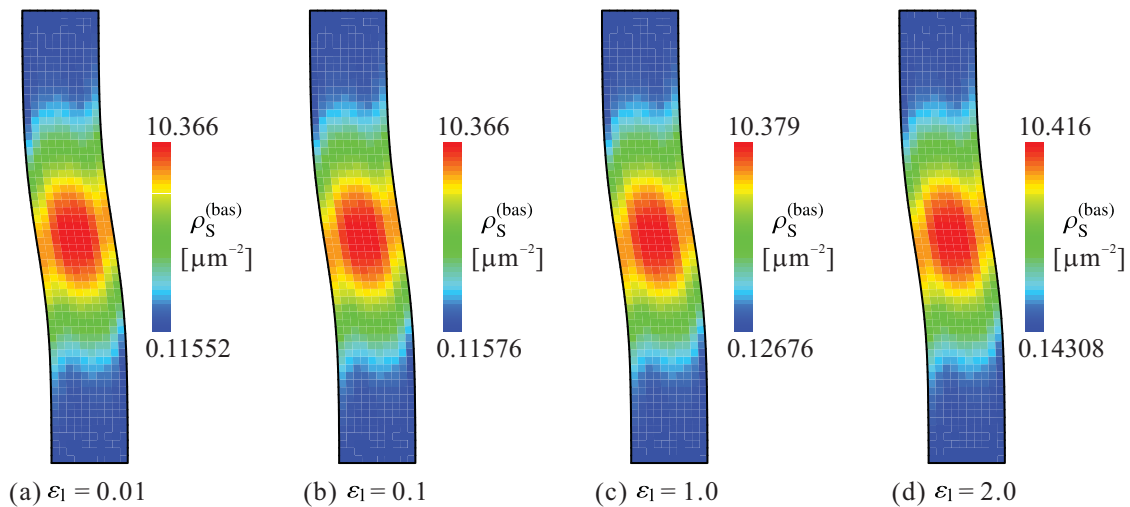


Fig. 7.39 Effect of length scale ratio on basal SS dislocation density at  $\varepsilon = 1.0\%$  ( $r = 2.0 \mu\text{m}$ ,  $\varepsilon_s = 1.1 \times 10^{-2}$ ).

### 7.2.3 キンク帯形成における寸法効果

本研究で構築した高次モデルには特性長が導入されるため、本モデルは寸法効果を有すると考えられる．そこで本項では、キンク帯形成における寸法効果を検討するために、まずはじめに図 7.40 に示すサイズの異なる 4 種類の試験片に対する解析を行う．ここで、図 7.40 に示すように各試験片の縦横比  $H:W$  は前項まで用いた試験片と同様に  $6:1$  で固定する．また、解析に用いる初期結晶方位および数値パラメータはそれぞれ図 7.2(b) および表 7.1 に示すものを用いる．さらに、高次量の境界条件には前項で示した式 (7.4) を適用し、特性長および特性長比はそれぞれ  $r = 1.0 \mu\text{m}$

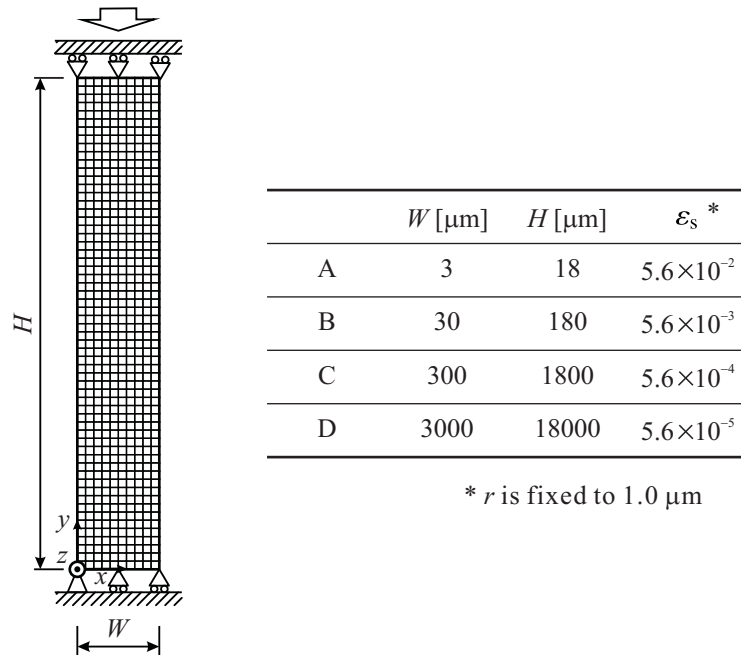


Fig. 7.40 Computational model for investigation of size effect.

および  $\epsilon_1 = 0.1$  に固定する。

図 7.41 は、4 種類の試験片に対する解析によって得られた公称応力-ひずみ線図である。同図より、サイズの小さな試験片 A および B がサイズの大きな試験片 C および D よりも大きな応力値を示しており、またサイズが最小の試験片 A の公称応力が最大であることがわかる。すなわち、試験片寸法が小さくなるほど強度が上がるという一般的な寸法効果を表現していることがわかる。したがって、本モデルにより寸法効果の表現が可能といえる。なお、試験片 C および D は各辺の大きさがそれぞれ 10 倍異なるにもかかわらず公称応力はほとんど同じである。すなわち、1.4 節で述べたようなサイズがおおよそ  $50 \mu\text{m}$  以上では寸法効果がみられないという実現象と整合した結果が得られている。また、図 7.42 は各試験片における 1.0% 圧縮後の底面すべりおよび GN 転位密度の刃状成分分布である。同図より、前述の傾向と同様にスケール比が大きな試験片において形成したキंक帯の幅は大きくなっていることが確認できる。また、図 7.42(a) のすべり分布と図 7.32(d) を比較すると両者ですべり分布はほとんど一致していることがわかる。これらの試験片は寸法および特性長  $r$  の値が異なるが、それらの比であるスケール比は等しい。すなわち、スケール比が等しければ相似的に得られる結果も近いものとなる。しかしながら、図 7.42(a) の GN 転位密度分布と図 7.33(d) を比べると GN 転位密度の大きさがおおよそ 10 倍異なることがわかる。すなわち、密度の次元を有する量には試験片サイズの比が反映される。

続いて、試験片の縦横比の影響を評価するために図 7.43 に示すような高さ  $H$  は一定で等しく、幅  $W$  のみが異なる 3 種類の試験片に対する同様の解析を行う。ここで、各試験片のメッシュ分割は一要素寸法が全て等しくなるように行っている。図 7.44 は、3 種類の試験片に対する解析により得られた公称応力-ひずみ線図である。同図より幅  $W$  が最も小さく、試験片縦横比が最大の試験片が最も小さな公称応力を示していることがわかる。寸法効果の観点からいえば、サイズが小

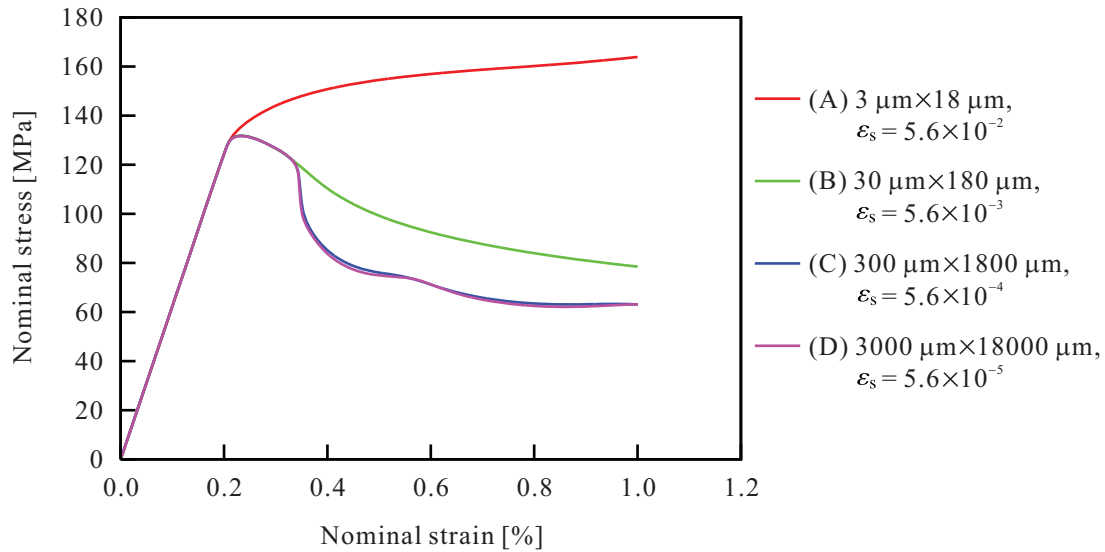
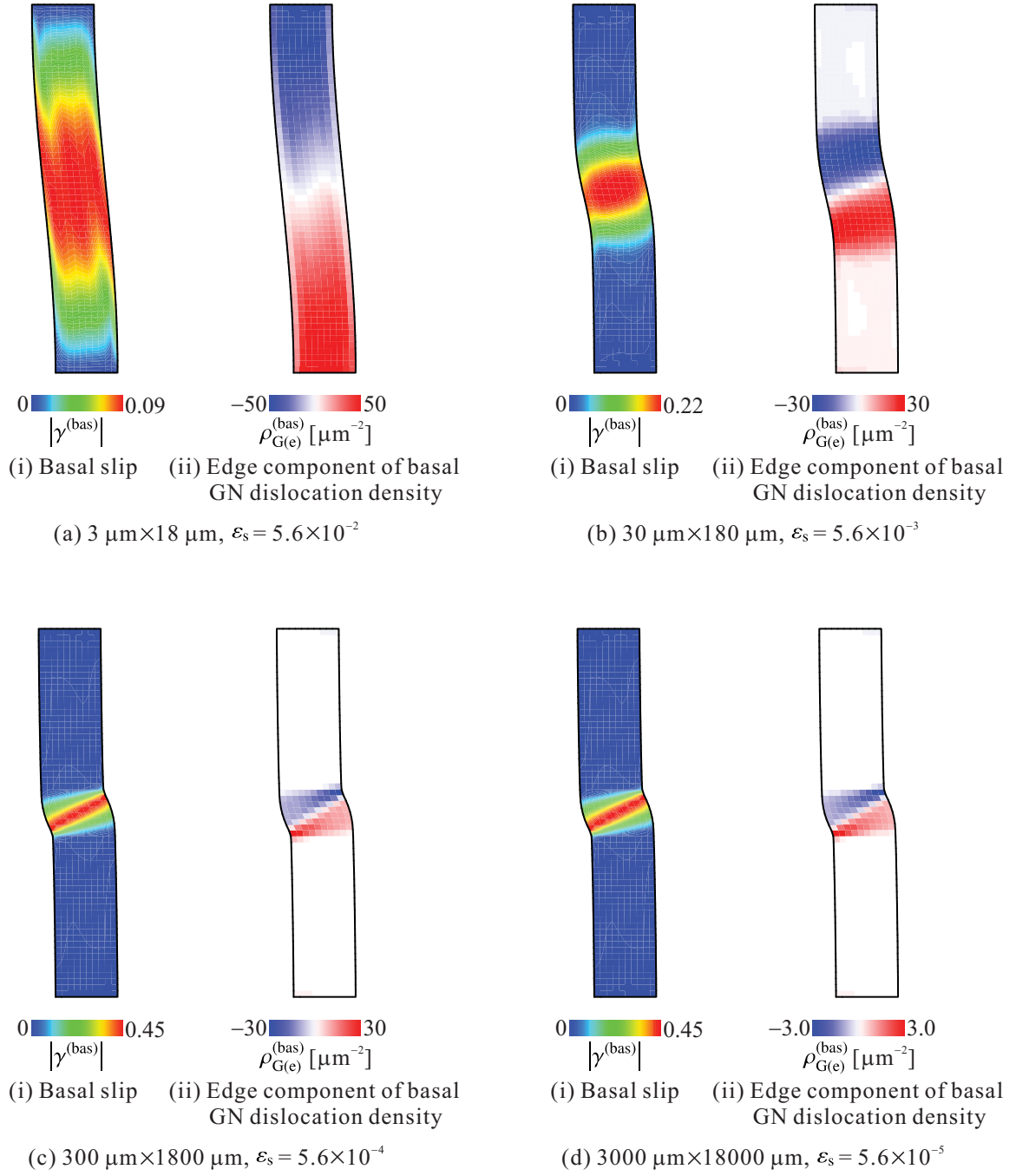


Fig. 7.41 Size dependence of nominal stress - strain curves with  $r = 1.0 \mu\text{m}$ .

さくなるほど強度は向上するはずである。しかしながら、キック変形は一種の座屈現象であるため、図 7.43(a) のような細長比が大きな試験片で変形が生じやすいと考えられる。この理由により細長比が大きな順に公称応力は小さな値を示したのである。なお、各試験片のおおよその細長比を記すと、矩形の断面を想定した場合には図 7.43 に示す表記の順にそれぞれ (a) 34.64, (b) 20.78 および (c) 10.39 となる。

また、図 7.45 は各試験片における 1.0% 圧縮後の底面すべりおよび GN 転位密度の刃状成分分布である。これらの結果から、全ての試験片で試験片中央部においてキック帯が形成されていることが確認できる。また、これらの試験片の高さは一定であり、特性長およびスケール比は等しいため形成したキック帯の幅も同じとなっている。この結果は前項までの考察と整合したものである。なお、本研究では式 (7.2) に示すようにスケール比の定義に代表長さとして試験片高さ  $H$  を採用しているが、この妥当性が図 7.45 の結果から示される。

Fig. 7.42 Size dependence of each value with  $r = 1.0 \mu\text{m}$  at  $\varepsilon = 1.0\%$ .

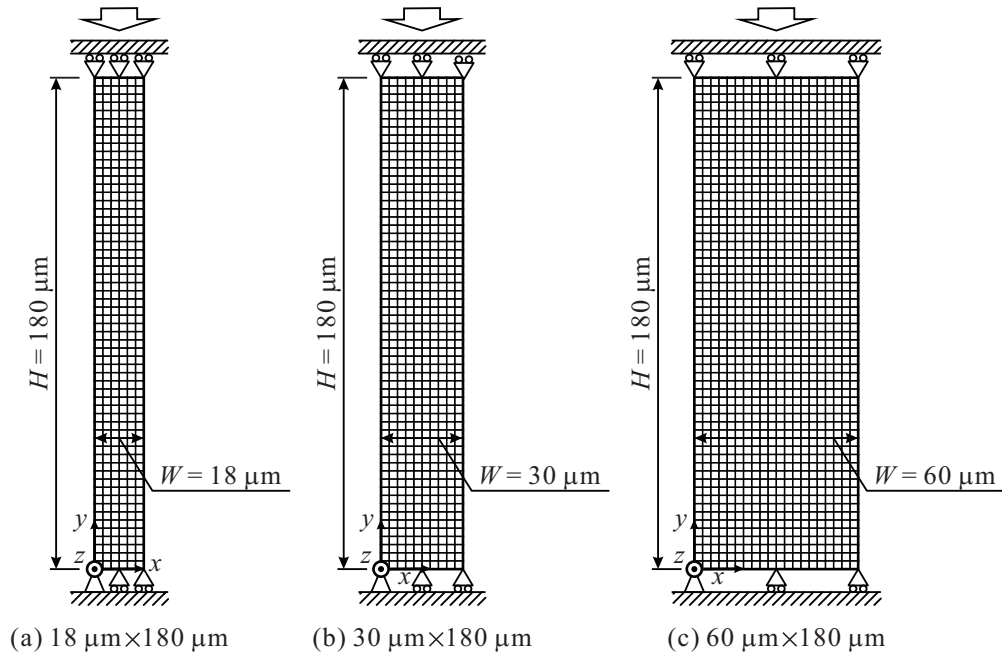


Fig. 7.43 Computational model for investigation of size effect with constant height.

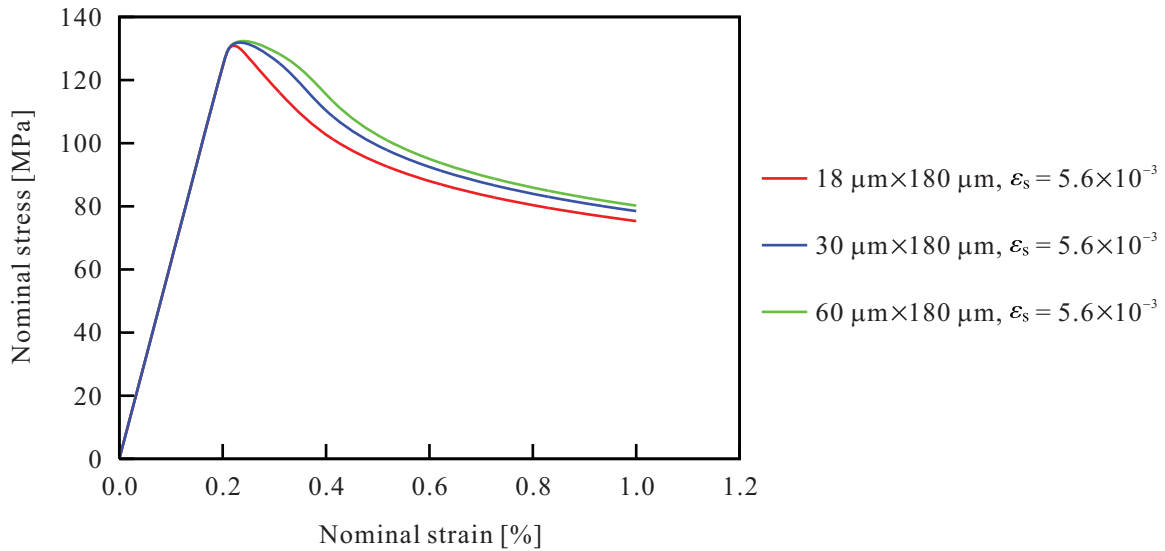
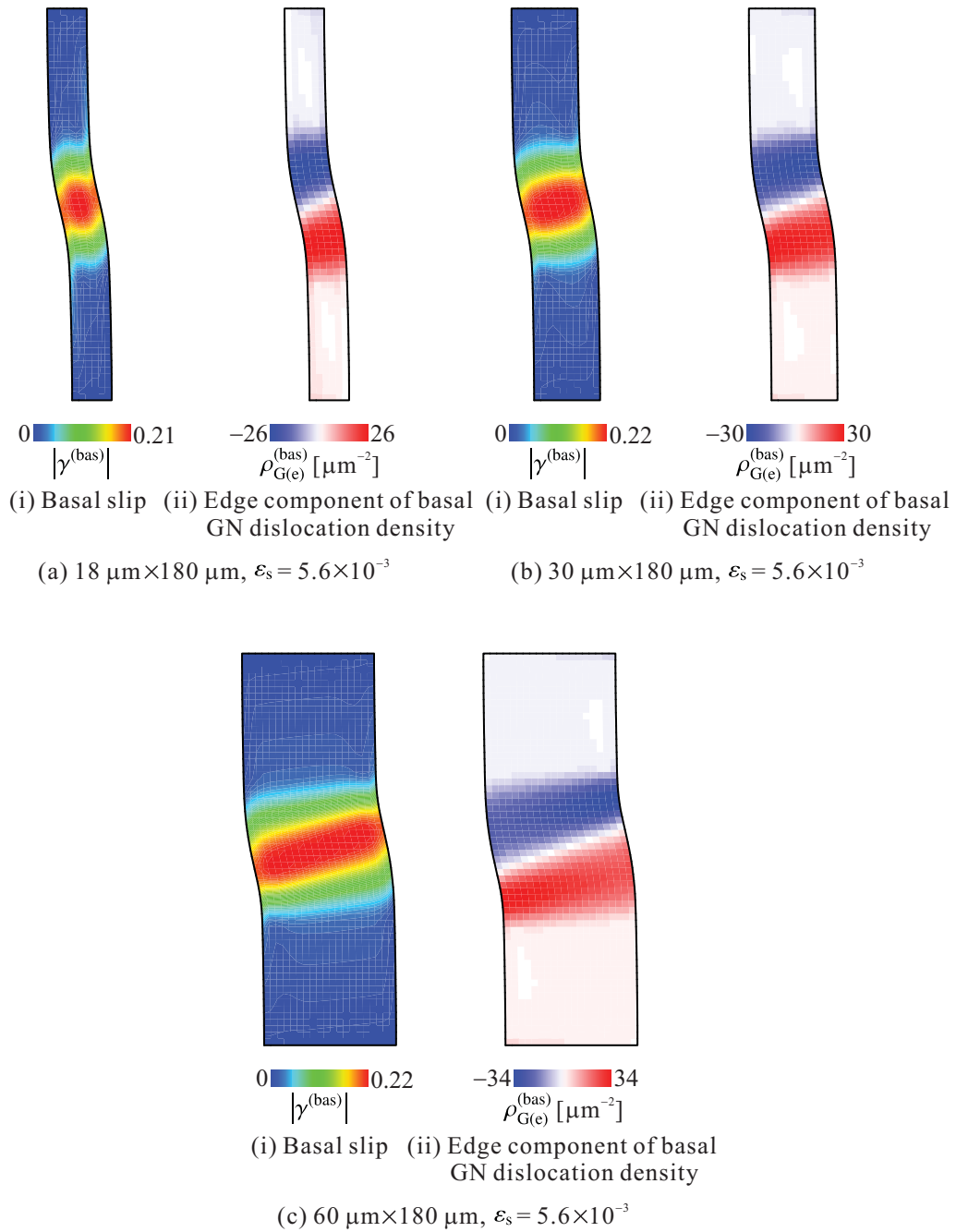


Fig. 7.44 Size dependence of nominal stress - strain curves related to constant height of specimen with  $r = 1.0\ \mu\text{m}$ .

Fig. 7.45 Size dependence of each value with  $r = 1.0 \mu\text{m}$  at  $\varepsilon = 1.0\%$ .

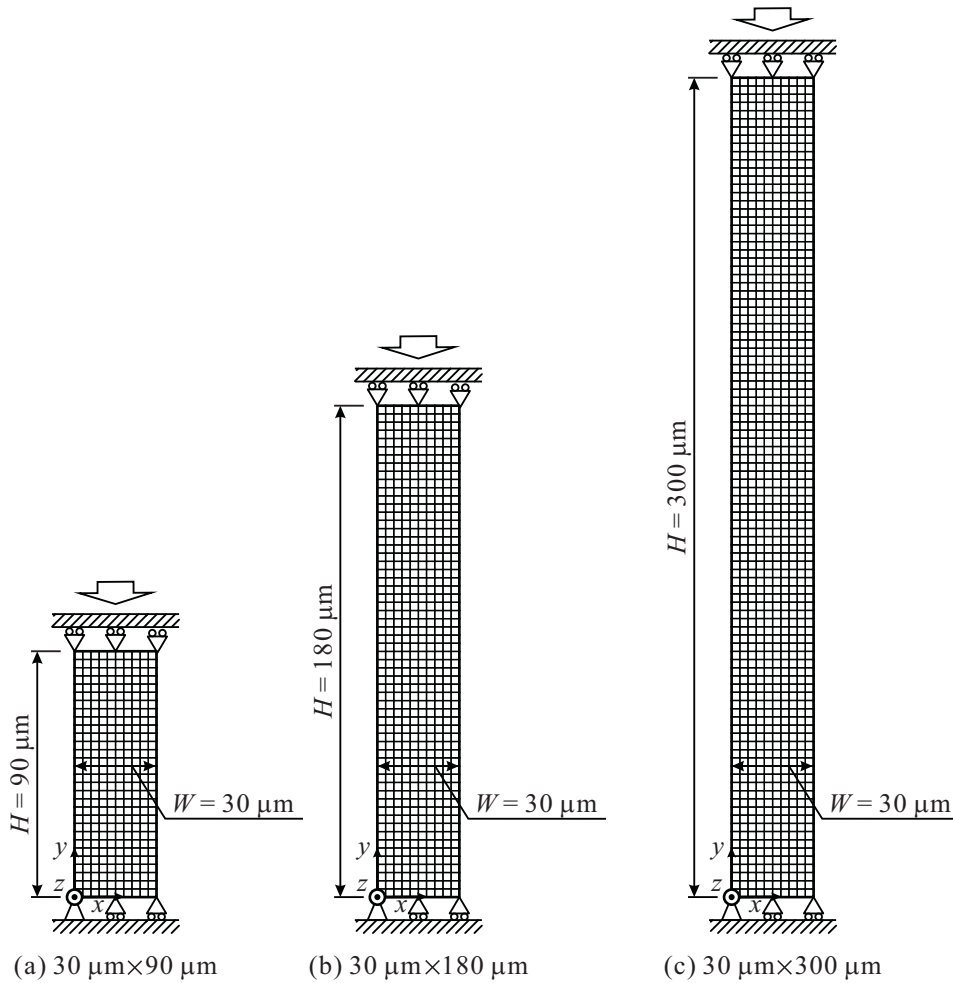


Fig. 7.46 Computational model for investigation of size effect with constant width.

次に、試験片の幅  $W$  を固定して高さ  $H$  のみを変化させた図 7.46 に示す 3 種類の試験片に対する解析を行う。ここで、メッシュ分割は先ほどと同じく一要素寸法が各試験片で等しくなるように行っている。図 7.47 はこの解析により得られた公称応力-ひずみ線図であり、前述の通り細長比の最も大きな図 7.46(c) の試験片が最も小さい公称応力を示している。また、図 7.46(a) の  $30\ \mu\text{m} \times 90\ \mu\text{m}$  の試験片と図 7.43(c) の  $60\ \mu\text{m} \times 180\ \mu\text{m}$  の試験片はそれぞれ等しい縦横比を有するが、図 7.44 および図 7.47 より寸法効果の点から前者の試験片の方でより大きな公称応力が生じている。

また、図 7.48 は各試験片における 1.0% 圧縮後の底面すべりおよび GN 転位密度の刃状成分分布である。ここで特筆すべき点は、全ての試験片において形成されたキンク帯の幅がほぼ一致しているということである。これらの試験片ではそれぞれ代表長さ  $H$  が異なるため、そのスケール比もそれぞれ異なるものとなる。ただし、これらに対する解析において特性長は共通である。したがって、異なるスケール比および共通の特性長を用いて図 7.48 のような共通の幅を有するキンク帯が形成したことから、キンク帯の幅を決定する因子は特性長であるといえる。

以上より、本高次モデルを用いた FEM 解析ではキンク帯形成に関する寸法効果を表現すること

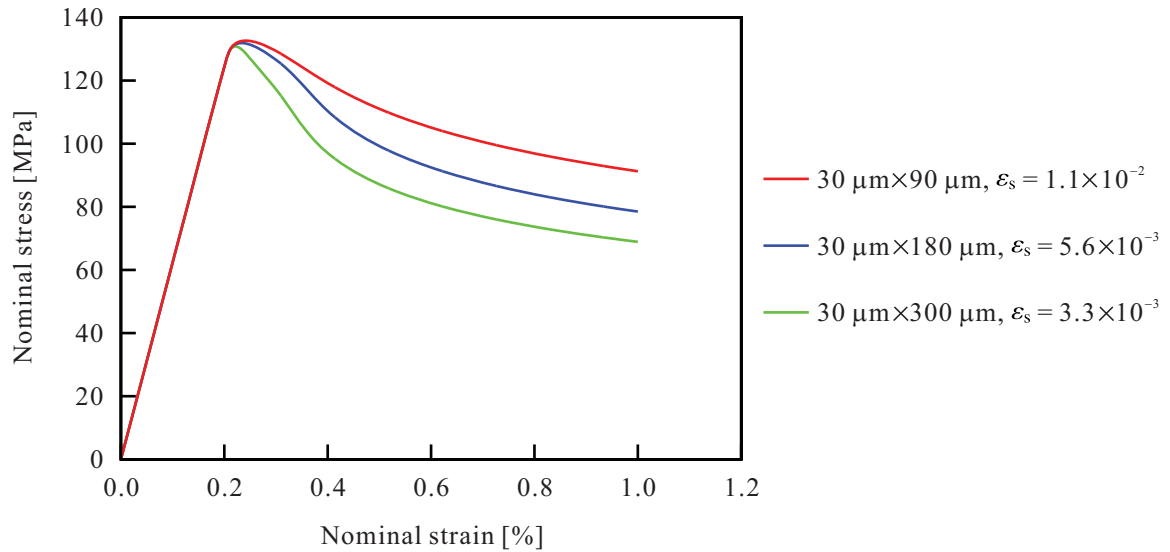


Fig. 7.47 Size dependence of nominal stress - strain curves related to constant width of specimen with  $r = 1.0 \mu\text{m}$ .

が可能である。また，形成するキンク帯の幅は特性長によって決定される。特性長は材料固有の物性値であるが LPSO 相におけるその値は報告されていないため，本解析では特性長に様々な値を与えた解析を行うことで材料の応答を評価してきた。その結果，特性長と変形がキンク帯の幅にて関連していることが判明した。実際に LPSO 相に形成するキンク帯の幅は実験的に計測可能であり，したがって今後キンク帯の幅に関する実験結果との比較を詳細に行うことで LPSO 相の特性長を本モデルを用いた数値解析により推定できると考えられる。



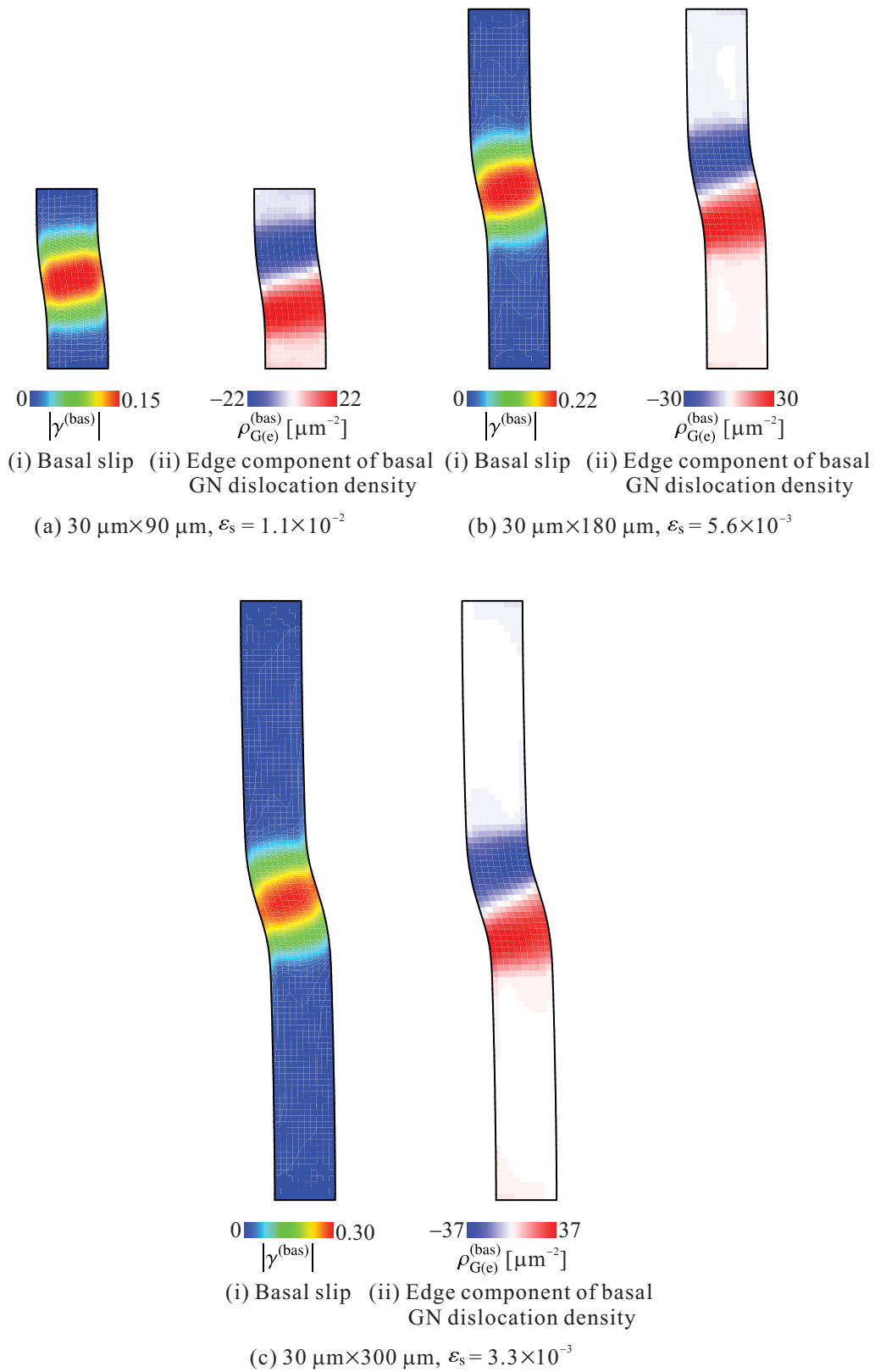


Fig. 7.48 Size dependence of each value with  $r = 1.0\ \mu\text{m}$  at  $\varepsilon = 1.0\%$ .

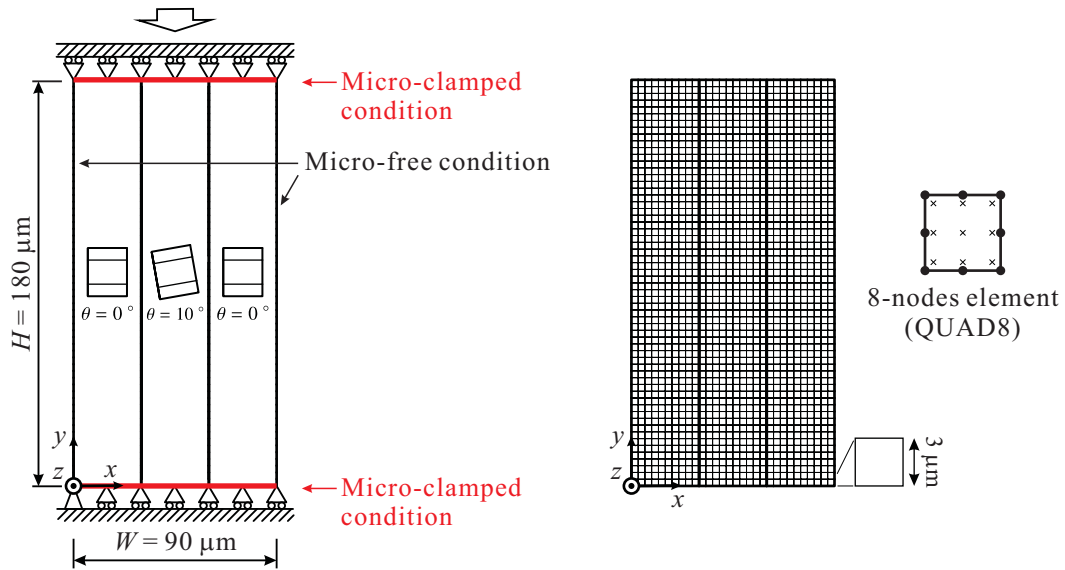


Fig. 7.49 Computational model for LPSO polycrystal.

### 7.3 LPSO 相多結晶に対する二次元 FEM 解析

本節では LPSO 相多結晶に対する二次元 FEM 解析を実施し、高次モデルで設定が可能となる結晶粒界におけるすべり速度の境界条件がキンク変形に与える影響を検討する。

図 7.49 は解析対象の LPSO 相多結晶平板であり、前節で用いた短冊状 LPSO 相単結晶を  $x$  軸方向に 3 つ並べた形で構成される。ここで、この解析モデルは図 1.10 に示す LPSO 相単相で構成される一方向凝固多結晶材を想定したものである。また、初期結晶方位は図 7.49 に示すように各結晶粒に与える。ここでは、中央の結晶粒のキンク変形に注目するために、その結晶粒のみキンク変形を発生しやすい方位としている。さらに、物性値および数値パラメータは前節と同様に表 7.1 に示す値を用いる。なお、図 1.10 のように一方向凝固材における個々の LPSO 相単結晶の奥行き厚さは幅方向に対して十分大きいので、7.2.1 節で述べたものと同様の理由から数値解析には平面ひずみ条件を採用できる。また、試験片表面における高次量の境界条件は式 (7.4) を用いて図 7.49 に示すように規定する。ただし、高次モデルでは試験片の表面だけでなく、材料内部の結晶粒界に対する境界条件も同様に設定できる。すなわち、結晶粒界上で式 (5.17)<sub>1</sub> のすべり拘束条件とした場合および式 (5.17)<sub>2</sub> のすべり自由条件とした場合の 2 通りの境界条件を設定できる。そこで本節では、それらの境界条件が変形に与える影響を検討する。なお、特性長には前節で示したようにキンク変形のメッシュ依存性の除去が確認されている  $r = 2.0 \mu\text{m}$  を用いて固定する。したがって、その際のスケール比は  $\varepsilon_s = 1.1 \times 10^{-2}$  となる。さらに、特性長比は前節の結果から値の選択による変形への影響は小さいと考えられるため、ここでは  $\varepsilon_l = 0.1$  とする。また、解析領域のメッシュ分割には計算コスト削減のために 8 節点四辺形要素を用い、図 7.49 に示すように試験片を  $30 \times 60$  分割する。なお、単結晶に対する解析において同じメッシュ分割数を用いた場合、9 節点要素と 8 節点要素の解析解の差は微々たるものであることを確認している。

図 7.50 は、結晶粒界において高次量に対する 2 通りの境界条件をそれぞれ設定した解析により

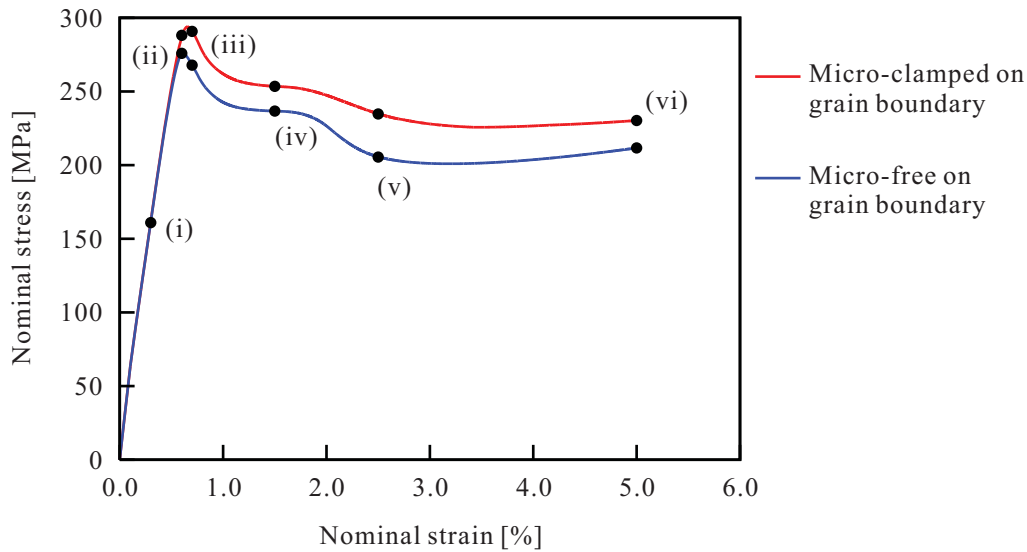


Fig. 7.50 Nominal stress - strain curves for polycrystal dependent on boundary condition for slip rate on grain boundary.

得られた公称応力-ひずみ線図である。同図より、粒界においてすべり拘束条件を適用した場合に公称応力は大きくなっていることがわかる。また、図 7.51 および図 7.52 はそれぞれ結晶粒界においてすべり拘束条件を用いた場合の底面すべり分布および GN 転位密度の刃状成分分布である。ここで、同図に示す各結果の圧縮率は、図 7.50 に示す圧縮率にそれぞれ対応している。まず、この多結晶における変形模様を順に確認すると、図 7.51(i) のように底面に初期傾斜がある試験片中央の結晶粒において底面すべりが発生する。そして、すべりに起因した結晶の格子回転により中央の結晶粒が回転し、それに引きずられて両側の結晶粒も剛体回転する。これにより両側の結晶粒においても底面系の Schmid 因子が有限な値となるため、これらの粒においても底面すべりが生じる。その後、図 7.51(iv) に示すように試験片中央部に結晶粒を横断したキンク帯が形成される。ここで、粒界上ですべり拘束条件を用いているにもかかわらず結晶粒を横断するキンク帯が生じた理由は、中央粒の格子回転にともなう前述の剛体回転が大きな役割を果たしたためと考えられる。すなわち、個々の結晶粒がそれぞれ独立にキンク変形するわけではなく、図 7.51(iv) のように多結晶が 1 つの構造としてキンク変形したと考えられる。また、図 7.51(v) および (vi) のようにさらに圧縮を続けると各粒は S 字状に褶曲している様子を確認できる。ここで、このような S 字状の褶曲は、単結晶に対する解析ではどんなに圧縮を続けても発生しないものである。すなわち、このような変形モードが生じるためには、多結晶における粒拘束等のキンク変形に対する横軸方向からの拘束が必要であると考えられる。続いて、図 7.52 より結晶粒界近傍に GN 転位が高密度で蓄積している様子を確認できる。これは、粒界上ですべり拘束条件を用いていることに起因する。すなわち、結晶粒内においてすべり量は有限な値を有する一方で、粒界上ではその値が零に拘束されるため、すべりには顕著な空間こう配が存在する。このすべりの空間こう配が GN 転位に相当するため、図 7.52 のような結果が得られたのである。また、このような高 GN 転位密度領域は、図 5.1(a) に示すような転位の堆積を表している。

一方、図 7.53 および図 7.54 はそれぞれ結晶粒界においてすべり自由条件を用いた場合の底面す

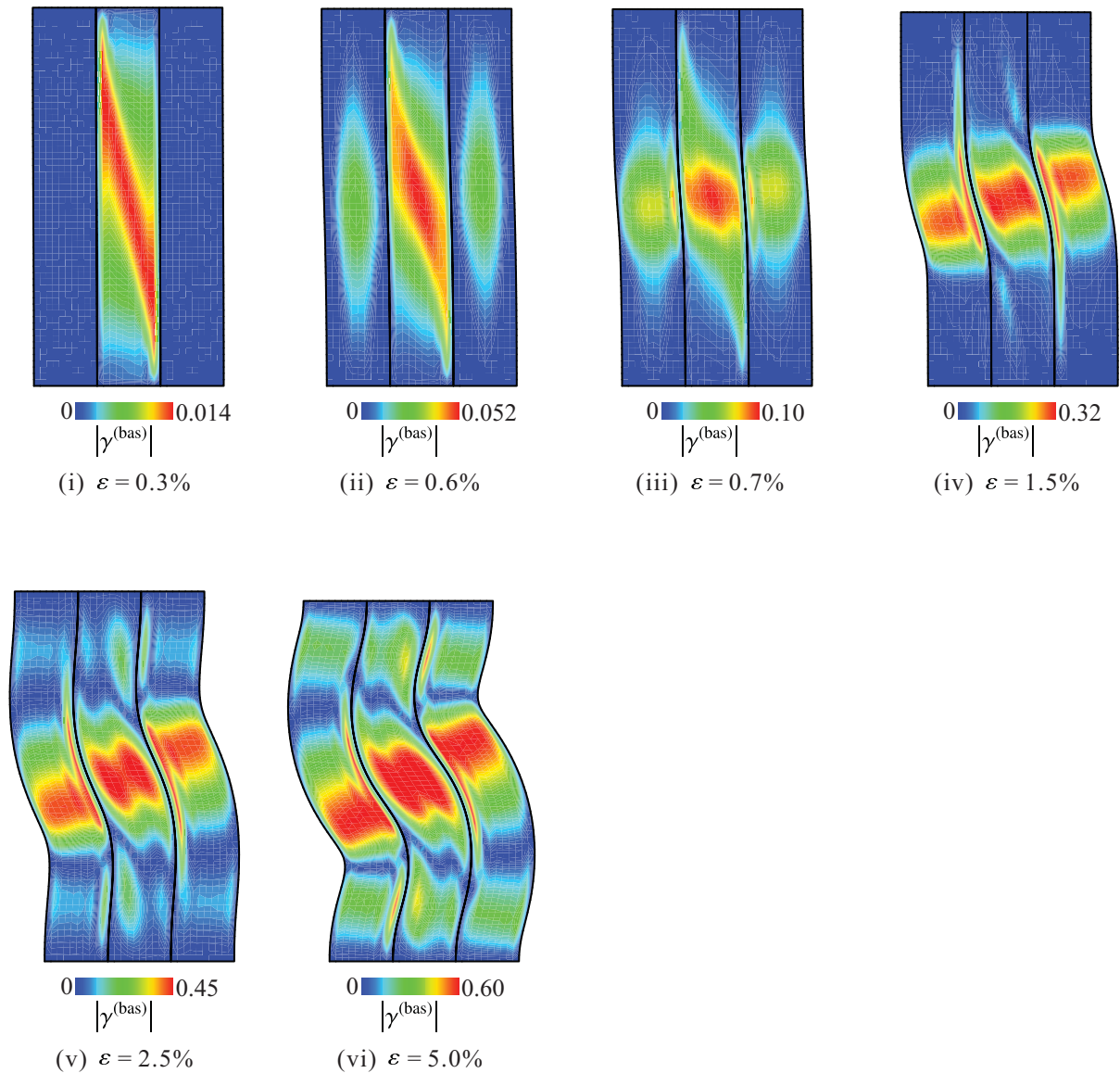


Fig. 7.51 Basal slip with micro-clamped condition on grain boundary.

べり分布およびGN転位密度の刃状成分分布である。この場合も、上述の粒界にてすべり拘束条件を適用した場合と同様の過程を経て変形は進行している。ただし、図7.54から確認できるように、この条件ではGN転位は粒界を完全に抜け切ることができるため、粒界におけるGN転位の堆積は図7.52と比較してわずかなものとなっている。

以上の結果を踏まえると、結晶粒界においてすべり拘束条件を用いた場合には粒界にGN転位が多数堆積するため、式(4.28)に従って粒界近傍に背応力場が形成されると考えられる。背応力は単調負荷における変形に対して逆力として働くため、大きな背応力場が形成されるほど材料は変形しにくい。また、GN転位の堆積により、式(4.37)を介して粒界近傍で顕著な加工硬化が引き起こされると予想される。図7.55は両境界条件における5.0%圧縮後の底面系の背応力分布であり、

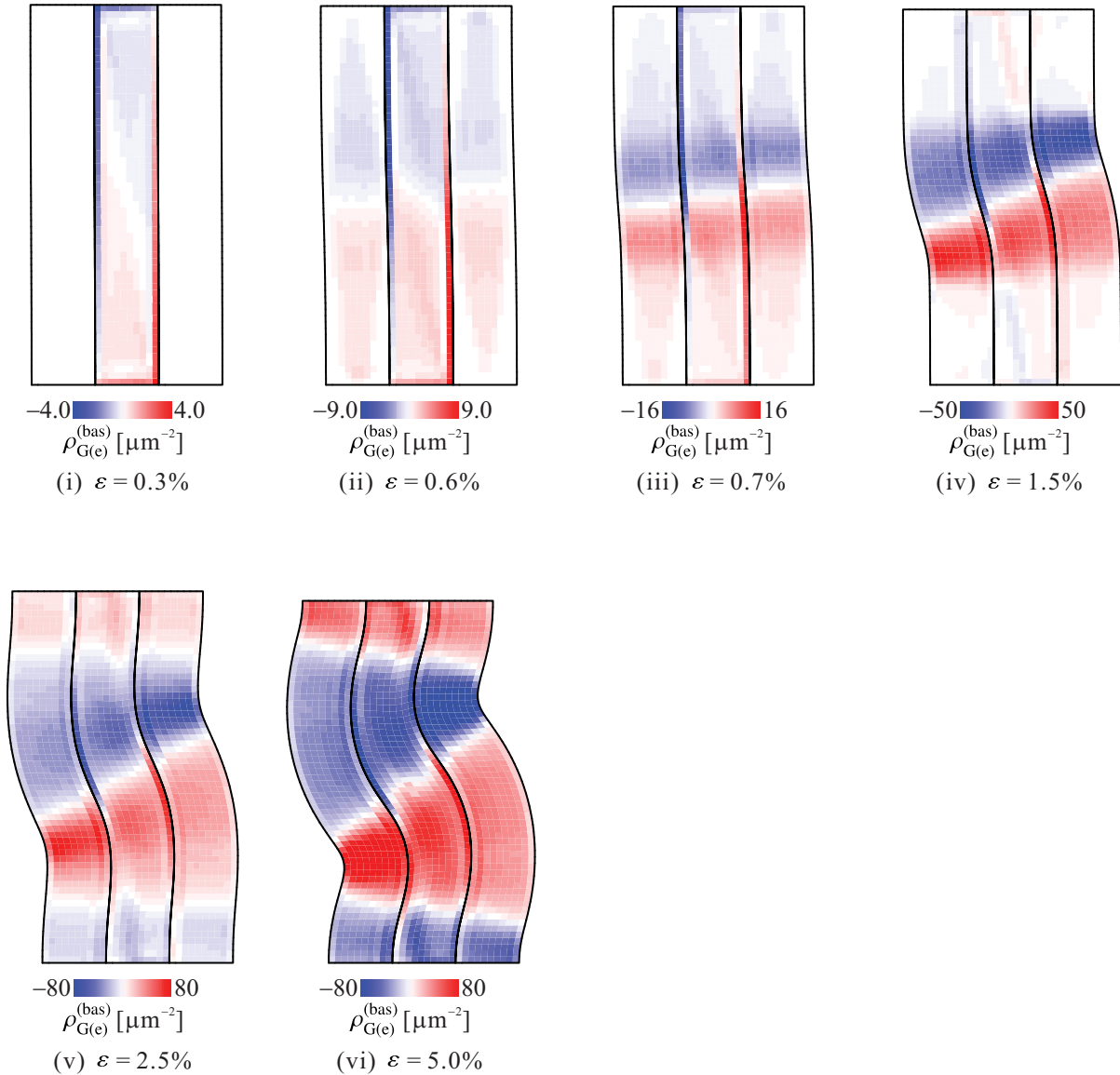


Fig. 7.52 Edge component of basal GN dislocation density with micro-clamped condition on grain boundary.

これらの結果からすべり拘束条件を用いた場合に粒界上で大きな背応力値が計算されている。したがって、形成した背応力場および堆積したGN転位による加工硬化の程度に起因して図7.50のような公称応力-ひずみ線図の差異が生じたのである。すなわち、結晶粒界においてすべり拘束条件を採用した場合には、粒界におけるGN転位の堆積による加工硬化ならびに背応力場形成により、同境界にすべり自由条件を用いた場合と比較して公称応力は大きなものとなる。

また、図7.56および図7.57は、図7.2(c)に示した底面系以外で比較的大きな活動がみられたすべり系の各境界条件における5.0%圧縮後のすべり分布である。図7.51、図7.53、図7.56および図7.57より、最も活動が支配的な底面系のすべりに対してその他のすべり系のすべり量は10のオーダー小さいことがわかる。また、図7.2(c)以外のすべり系は、試験片の曲率が大きい自由表面および



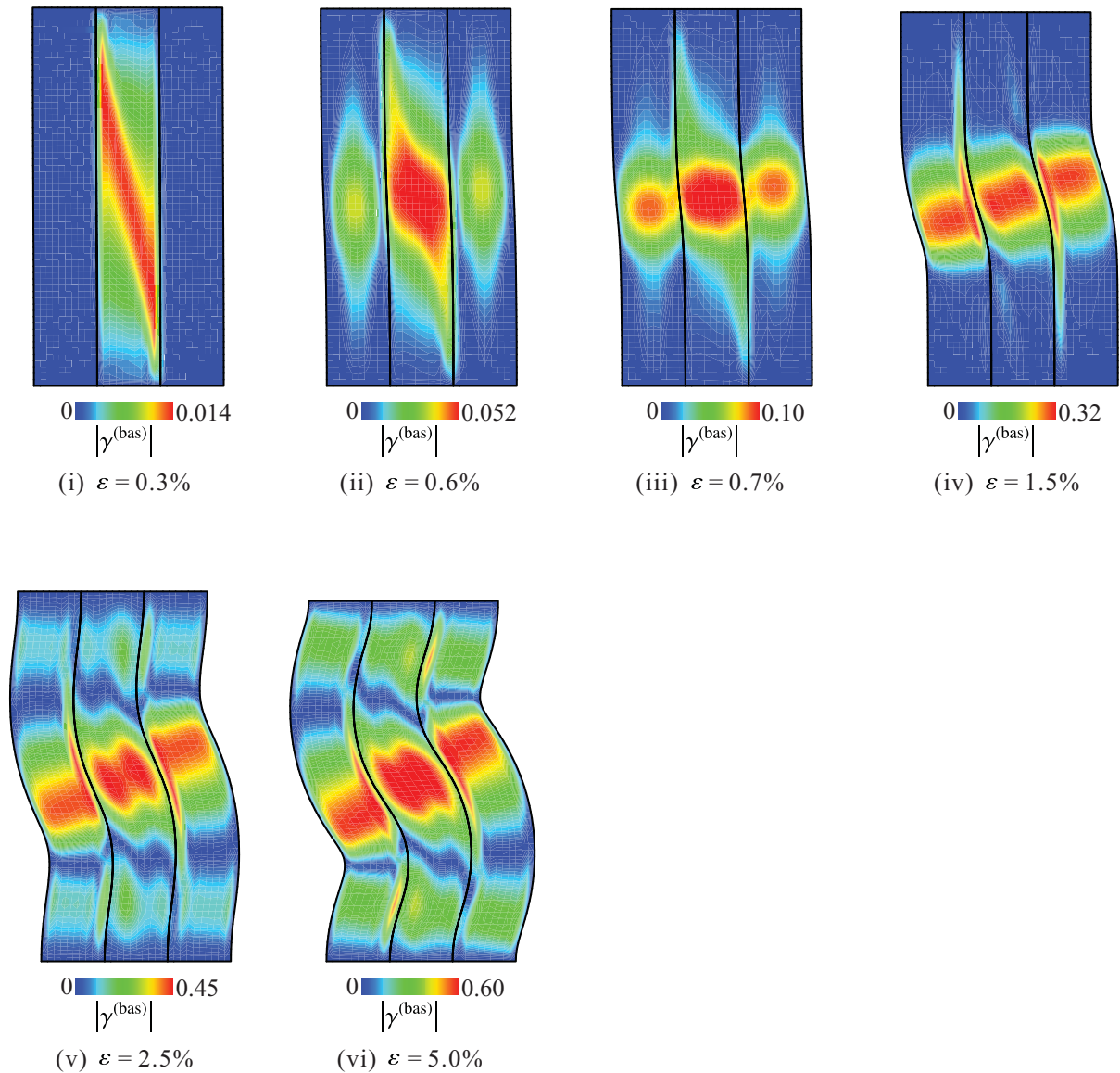


Fig. 7.53 Basal slip with micro-free condition on grain boundary.

結晶粒界近傍で活動している。さらに、図 7.56 より、粒界にすべり拘束条件を用いた場合には粒界付近で二次錐面系の活発な活動がみてとれる。ここで、図 7.58 は各境界条件における  $\varepsilon = 5.0\%$  後の相当応力分布である。同図より、結晶粒界近傍には応力が集中していることがわかる。本解析で用いている初期結晶方位では、最も活動が生じる図 7.2(c) の底面系は HCP の  $a$  軸方向（ここでは、紙面内縦方向にほぼ対応）のひずみしか発生しないため、その活動だけでは図 7.58 のような応力集中を十分に緩和することができない。そこで、この応力集中の緩和のために  $c$  軸方向成分のひずみを発生することのできる錐面系が活動したものと考えられる。一方、粒界にすべり自由条件を用いた場合には粒界におけるすべりの自由度が限定されないため、底面系の活動によって応力緩和が十分になされ、その箇所における錐面系の活動は小さなものとなったと考えられる。

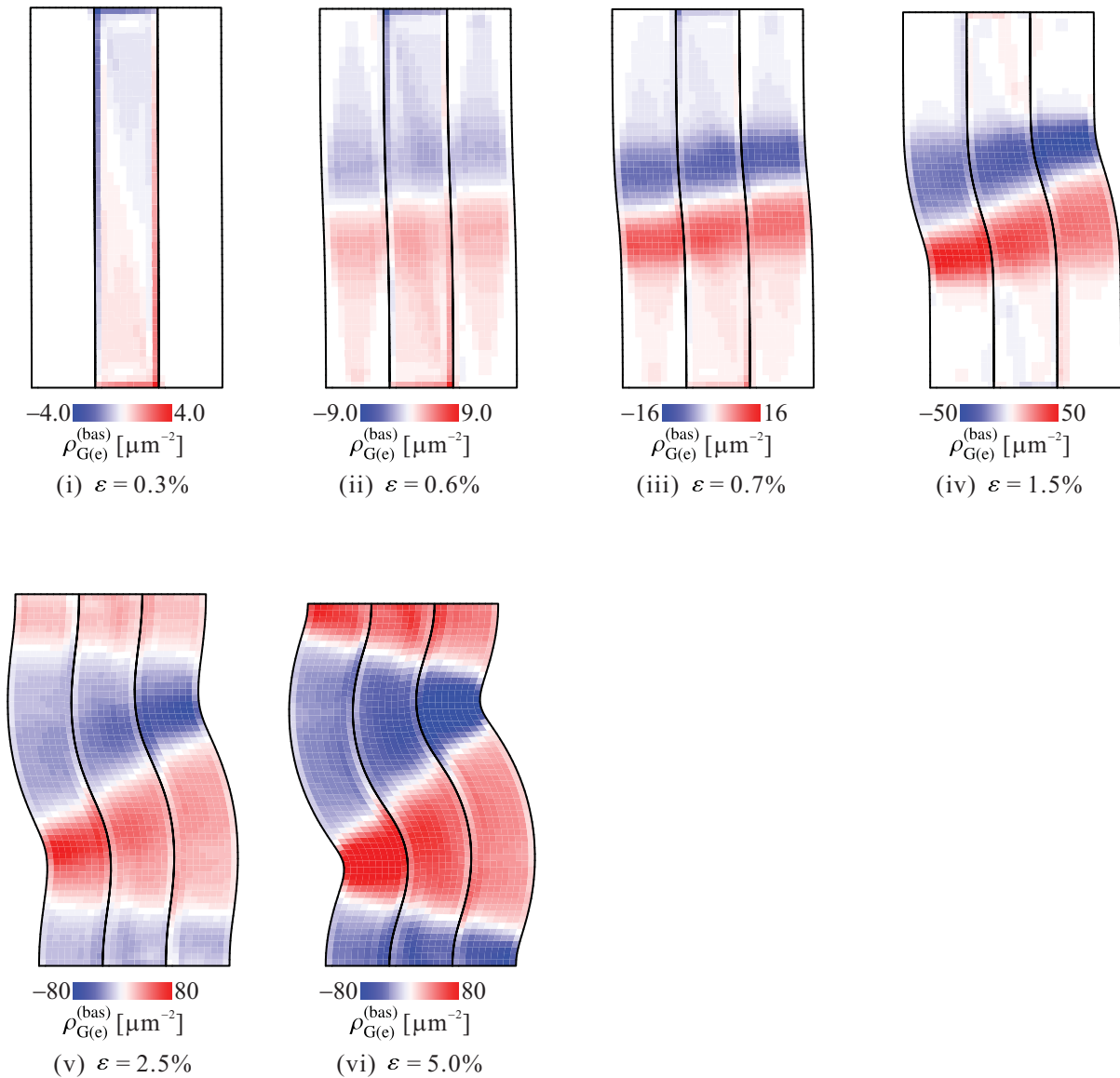


Fig. 7.54 Edge component of basal GN dislocation density with micro-free condition on grain boundary.

また、本解析では傾角粒界のみを対象としたが、図 7.49 において両側の結晶粒の初期方位をそれぞれ  $c$  軸周り（ここでは  $x$  軸に一致）に  $30^\circ$  回転させてねじれ粒界を考慮しても得られる解析結果の傾向は前述のものとはほぼ同じであった。

なお、両境界条件を用いた解析結果において、形成するキンク帯の幅などの様相には大きな差はみられなかった。これはキンク帯が粒内部で発生し徐々に粒界に進展していくことで形成するというわけではなく、図 7.51～図 7.54 のように構造として多結晶で 1 つのキンク帯が瞬時に形成したためと考えられる。そこで今後は、キンク変形を材料内部から発生させるために、粒形状の不整などの種々の初期不整を考慮する、もしくは構造としてキンク変形しにくいような縦横比を設定する一方で材料内部の個々の結晶粒ではキンク変形しやすいような初期方位を選定した解析を

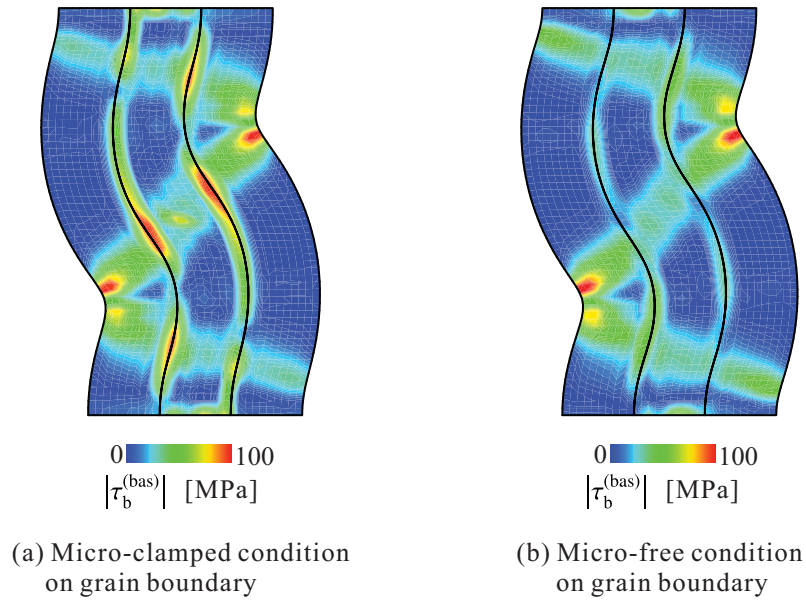


Fig. 7.55 Back stress of basal slip system dependent on grain boundary condition at  $\varepsilon = 5.0\%$ .

実施する必要がある。また，多結晶に対する解析という点では，1.1.2項で述べた  $\alpha$ -Mg 相および LPSO 相の二相で構成される図 1.8 に示すような鋳造押出材に対する解析が望まれる。ただし，前述のように  $\alpha$ -Mg 相では双晶変形が生じやすいため，二相材を解析対象とする場合には双晶変形のモデル化が別途必要となる。なお， $\alpha$ -Mg 相における双晶変形の発生を無視した場合の解析例を補足 D.3 に記す。



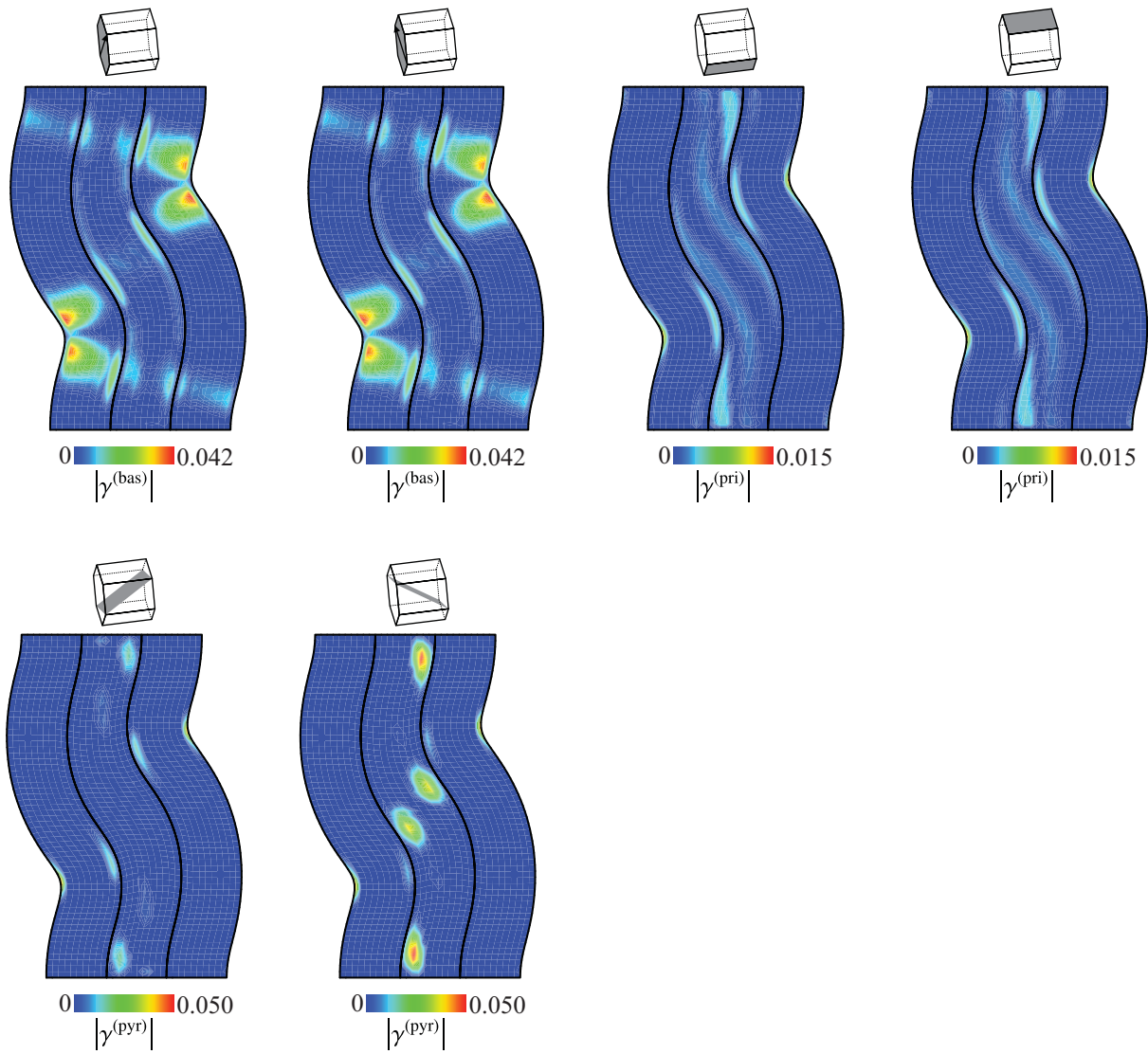


Fig. 7.56 Activation of other slip systems with micro-clamped condition on grain boundary at  $\varepsilon = 5.0\%$ .

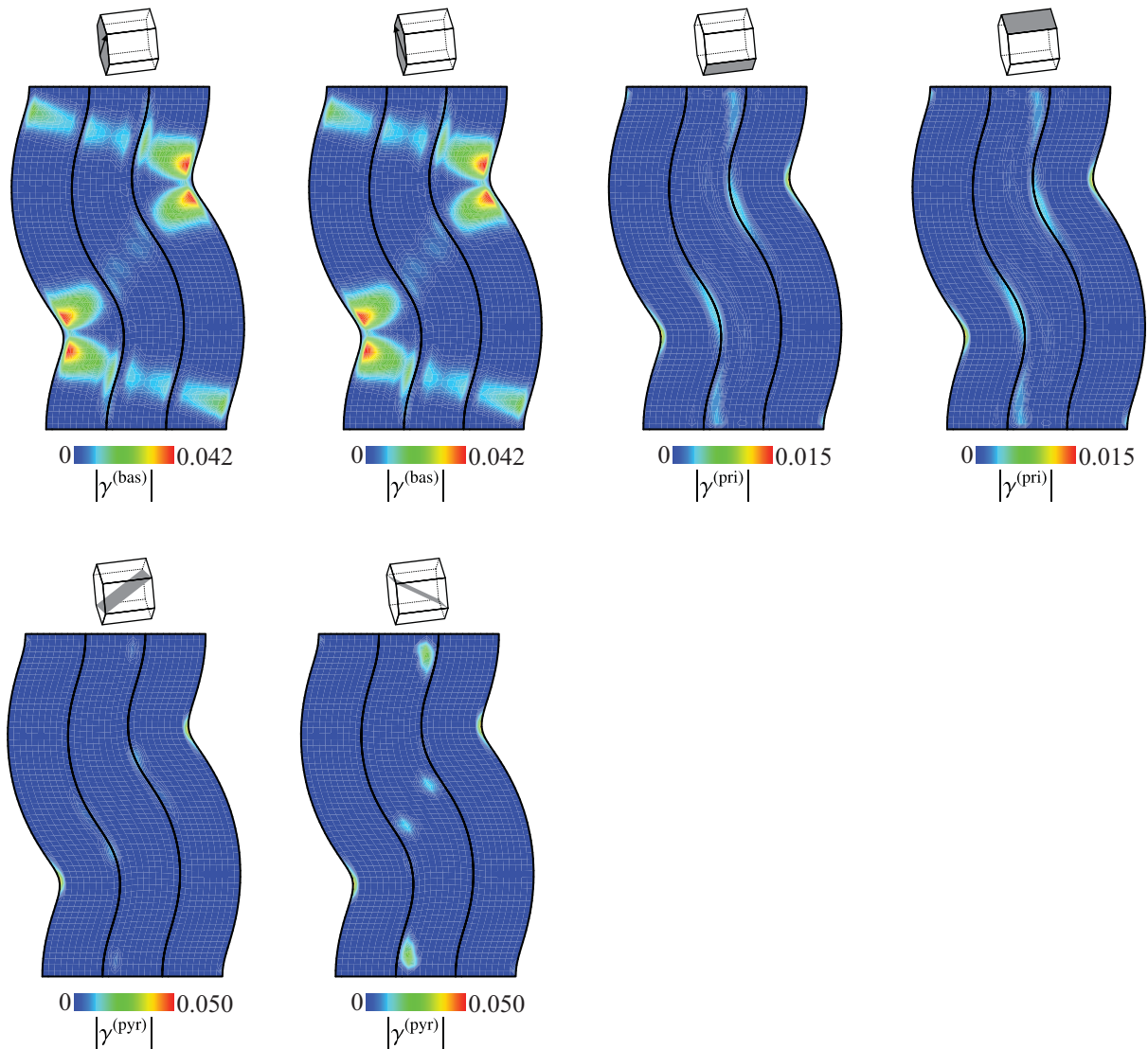


Fig. 7.57 Activation of other slip systems with micro-free condition on grain boundary at  $\varepsilon = 5.0\%$ .

## 7.4 回位四重極の表現

本節では、キック変形を特徴づける回位四重極の表現方法を検討する。

1.1.2項で述べたようにキック帯は回位を用いた表現も可能であり、その場合には図 1.19 に示すようにキック帯は正負の符号を有する回位の四重極構造により表される。ここで、回位は非 Riemann 塑性論<sup>(85)</sup>において材料空間の曲率として表され<sup>(81)</sup>、転位が並進性の結晶欠陥であるのに対して回位は回転性の結晶欠陥となる。回位の数理的表現方法として、例えば deWit<sup>(136)</sup>の理論では塑性曲率を連続体モデルに導入し、その回転をとることで回位を定義している。これはちょうど、GN 転位が式 (2.116) のように塑性変形こう配の回転により表されることに対応している。しかしながら、deWit<sup>(136)</sup>の手法では曲率を扱う上で物質点にマイクロな回転自由度が新たに必要となる。したがって、Cosserat 連続体理論<sup>(68)(137)</sup>のような一般化連続体理論を考えなければならず、理

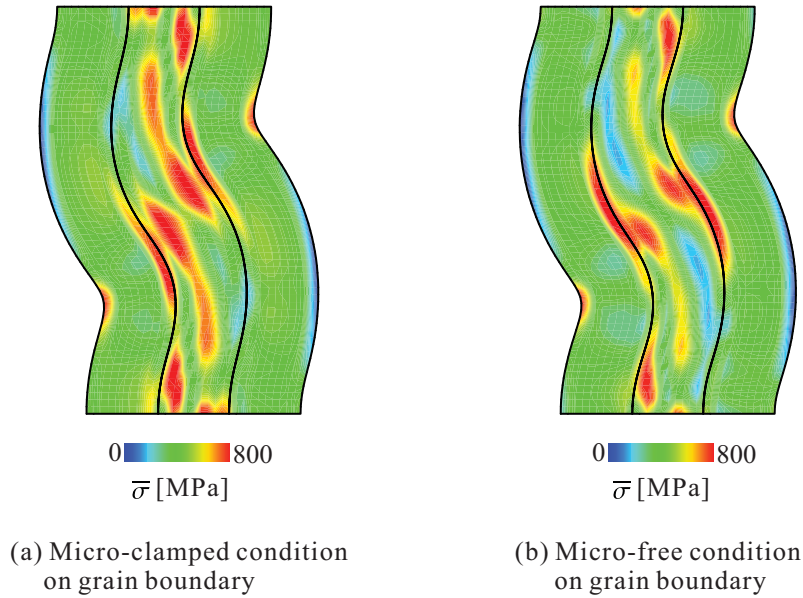


Fig. 7.58 Equivalent stress dependent on grain boundary condition at  $\varepsilon = 5.0\%$ .

論構築が非常に複雑なものとなる．一方，非 Riemann 塑性論<sup>(85)</sup>において4階の曲率テンソルを縮約したひずみの不適合度は，孤立転位以外の結晶欠陥を表現できるとされている<sup>(86)</sup>．そこで，本節では不適合度を用いた回位四重極構造の表現手法を検討する．

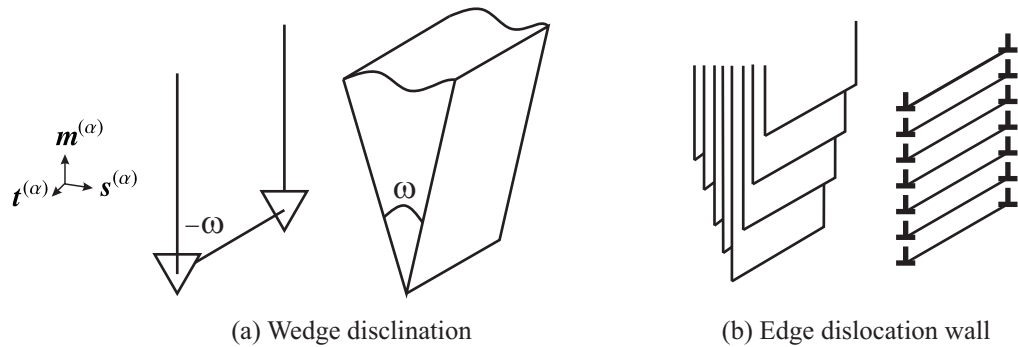
一般に，不適合度とはひずみの適合条件の不整合性を表したものであり，Aoyagi-Shizawa<sup>(62)</sup>は結晶塑性モデルに適したすべりの不適合度として次式を定義している．

$$\begin{aligned}
 \eta^{(\alpha)} &\equiv \text{curl} \left[ \text{curl} \left( \gamma^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} \right)_S \right]^T \\
 &= \tilde{b}^{(\alpha)} \left( \nabla \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)} \right) \left( \mathbf{t}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)} \right)_S - \tilde{b}^{(\alpha)} \left( \nabla \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)} \right) \left( \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} \right)_S \\
 &\quad + \tilde{b}^{(\alpha)} \left( \nabla \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)} \right) \left( \mathbf{t}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}^{(\alpha)} \right)_S - \tilde{b}^{(\alpha)} \left( \nabla \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)} \right) \left( \mathbf{t}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} \right)_S \dots \dots \dots (7.5)
 \end{aligned}$$

ここで，Aoyagi-Shizawa<sup>(62)</sup>はすべりの不適合度を転位対密度を表現する幾何学量として考えているため，2.7節で述べたように転位密度の表現の分解能依存性から式(7.5)右辺にGN転位密度と関連させた転位間距離を表す係数を乗じている．しかしながら，本研究では転位対密度はSS転位密度によって表現されるため，不適合度にそのような操作は行わない．ここで，式(7.5)の第2等式右辺第3項の成分はGN転位密度の刃状成分のすべり面法線方向こう配を表しており，図7.59に示すように $|\omega|$ の大きさのFrankベクトルを有する回位のくさび成分（以下，くさび形回位と呼称）と等価である<sup>(48)</sup>．そこで，この成分をくさび形回位成分と称すこととし，その記号を次式にて定義する．

$$\eta_d^{(\alpha)} \equiv \tilde{b}^{(\alpha)} \left( \nabla \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (7.6)$$

したがって，前節までの解析結果において $\rho_{G(e)}^{(\alpha)}$ の $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ 方向のこう配をとれば回位密度を表示できるはずである．しかしながら，本理論体系に基づいた有限要素法ではGN転位密度は積分点の量

Fig. 7.59 Equivalence between wedge disclination and edge dislocation wall<sup>(48)</sup>.

として計算されるため、数値計算上はそのこ配を単純にとることはできない。すなわち、 $\rho_{G(e)}^{(\alpha)}$ の空間こ配をとるためには何らかの操作を行い、積分点量であるGN転位密度を節点量に外挿する必要がある。なお、この様な議論は従来の転位-結晶塑性FEM解析においてもなされている。従来の理論では、すべりが積分点量として計算されるため、すべりのこ配であるGN転位密度の計算にはすべりの節点への外挿が必要であった。積分点量の節点への外挿には、要素内平均した値をさらに共有要素間で相加平均する手法<sup>(62)</sup>、形状関数による内挿の逆関係を用いる手法<sup>(138)</sup>、最小二乗法を用いる手法、Newton-Cotes求積法を用いて節点上にあらかじめ積分点を配置する手法等が考えられる。本研究では、外挿操作の簡易さおよび2次以上の要素における計算精度の良さなどの理由から近藤<sup>(118)</sup>が提案した手法を用いる。これは、ローカルな節点には各要素において位置的に最も近い積分点の値を与え、その後グローバルな節点に関して相加平均をとるという手法である。すなわち、節点におけるGN転位密度として、近接積分点のGN転位密度のグローバルな相加平均を用いる。これによりGN転位密度を節点に与え、通常のFEMと同じく形状関数を用いてそのこ配を式(7.6)に従って計算する。なお、このくさび形回位密度の計算はあくまでもその結果出力のためのものであり、硬化則ならびに構成式にはその値は一切反映されないことに注意されたい。また、前述の積分点量の外挿方法およびその外挿精度に関しては近藤<sup>(118)</sup>が詳しい。

図7.60は特性長 $r = 1.0 \mu\text{m}$ ならびにスケール比 $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$ を用いた場合の1.0%圧縮後における(a)底面系のGN転位密度分布および(b)前述の手法を用いて計算したくさび形回位密度成分である。ここで、同図(b)に示すくさび形回位密度成分の値は積分点において算出されるが、分布の傾向を見やすくするためにコンター表示している。また、変形に関するこの解析結果は7.2.2項のものと同じであり、図7.60(a)は図7.33(a)の結果を再掲したものである。図7.60(b)の計算結果をキンク帯における回位分布と比較すると、図7.60(b)のくさび形回位密度の分布は図1.19(c)における回位分布モデルと整合しておらず、回位四重極構造を表現できていない。ここで、回位二重極はそもそも図1.19(b)に示すように終端をもつ転位列を表現するものであり、図1.19(c)の回位四重極モデルにおいて自由表面で転位密度は零となる。したがって、転位密度の値が零となり、転位列がそこで終了しているという情報が無い限り回位を表現できない。ただし、本解析では自由表面にはすべり自由境界条件を適用しているため、自由表面上でGN転位密度は必ず零となる。ここで、図7.60(a)では計算結果の出力上、自由表面においてもGN転位密度が値を有しているかのような表示となっているが、理論的には自由表面においてその値は零となるはずである。しかしながら、

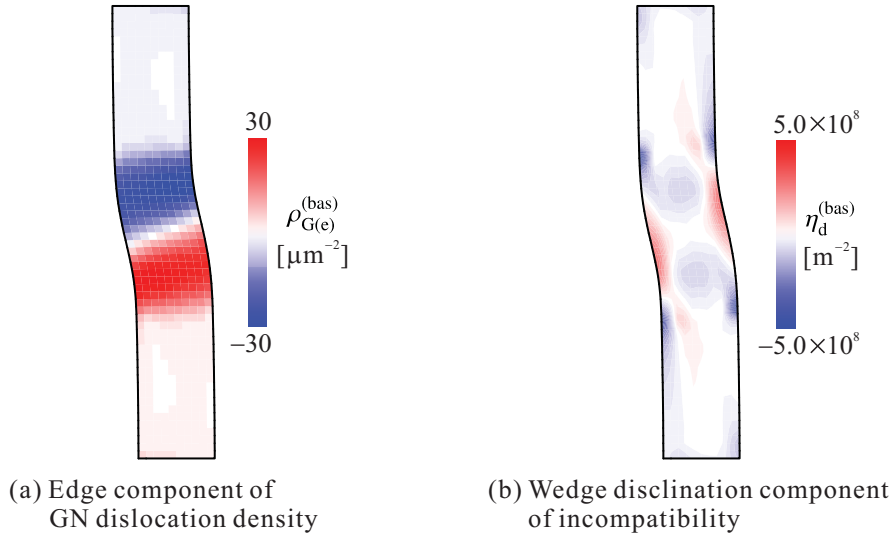


Fig. 7.60 Representation of disclination quadrupole by incompatibility with  $r = 1.0 \mu\text{m}$ .

本モデルでは実際には自由表面上でGN転位密度は計算されず、わずかに試験片内部に位置した積分点にてその値が計算されている。さらに、積分点は自由表面上に位置しない限り、そのGN転位密度の値は零とはならない。したがって、そのような積分点の値を用いてGN転位密度を節点に外挿したことにより、図7.60(b)のように回位密度を適切に表現できなかつたものと考えられる。そこで、GN転位密度の外挿の方法をわずかに修正する。ただし、節点においてGN転位密度の相加平均をとるまでは前述と同じであるが、その段階でGN転位密度に対する境界条件を加味して自由表面上の節点におけるGN転位密度の値を零に置き直す。つまり、本解析条件においてGN転位は自由表面を完全に抜け切ることができるため、外挿後の自由表面におけるGN転位密度は

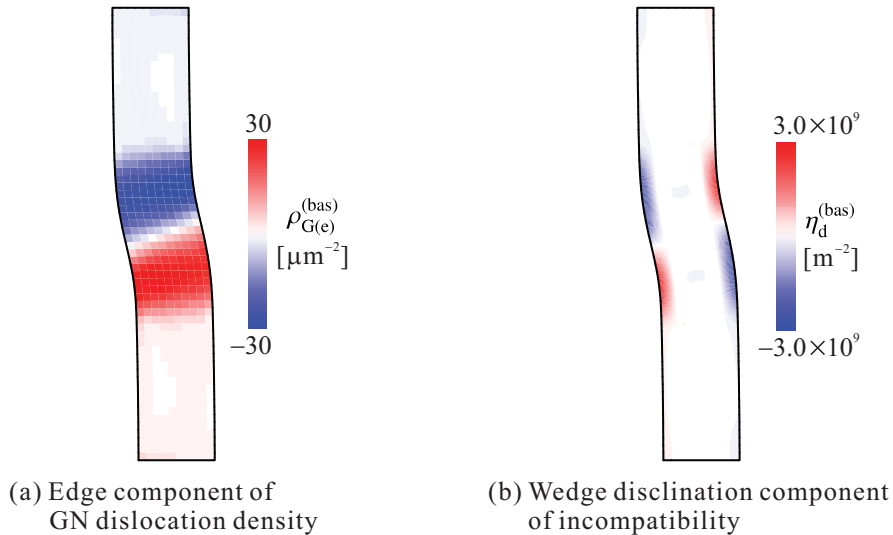


Fig. 7.61 Representation of disclination quadrupole by incompatibility considering boundary condition for GN dislocation density with  $r = 1.0 \mu\text{m}$ .

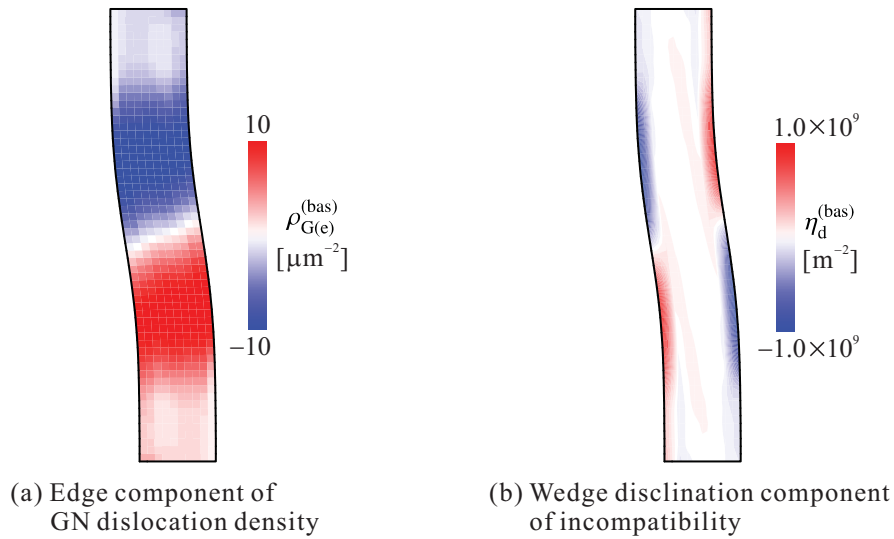


Fig. 7.62 Representation of disclination quadrupole by incompatibility considering boundary condition for GN dislocation density with  $r = 2.0 \mu\text{m}$ .

理論的には零となる．しかしながら，外挿の誤差により必ずしも該当する節点において GN 転位密度が零となっていないため，その値を零に再設定するのである．この手法を用いて GN 転位密度を節点に振り分け，式 (7.6) を用いて計算したくさび形回位密度の分布を図 7.61(b) に示す．なお，同図 (a) には対比のために前述と同じ GN 転位密度を掲載している．図 7.61(b) および図 1.19(c) を比較すると，回位密度の本出力結果はキンク帯における回位四重極構造を定性的に再現できていることがわかる．したがって，GN 転位密度の境界条件を設定し，すべりの不適合度の成分を用いることで回位四重極構造を表現可能といえる．

以上より，一般化連続体理論を適用せずとも，すべりの不適合度を用いることでキンク帯における回位四重極構造を定性的に表現できる．ただし，数値計算において GN 転位密度を節点へ外挿する際に，自由表面上の GN 転位密度の値を零に再設定する操作が必要である．また，図 7.62 に特性長  $r = 2.0 \mu\text{m}$  の場合における同様の計算結果を示す．同図より，キンク帯の幅が大きい場合にもその回位四重極を表現できていることがわかる．



## 8章

# 結言

### 8.1 本論文の結言

本研究では、LPSO型Mg合金の強化要因とされるLPSO相のキンク帯形成を数値解析的に表現することを目的とし、キンク帯形成のメッシュ依存性の軽減を念頭において理論構築を行った。その際、LPSO相の変形異方性を簡便に表現でき、かつ転位密度に基づいて加工硬化を表現可能な転位-結晶塑性モデルを高次応力を考慮した理論体系に基づいて構築した。その手法として、高次応力をGN転位密度にエネルギー共役な力として仮想仕事の原理に導入し、GN転位由来のすべり面の曲率を考慮して従来のSS転位密度モデルを拡張することにより高次理論に適した硬化則を新たに構築した。

続いて、構築したモデルに基づいたFEM解析をLPSO相単結晶に対して実施し、本モデルによるキンク帯形成のメッシュ依存性を特性長と試験片寸法の比で定めるスケール比の観点から検討した。また、特性長に依存して形成されるキンク帯の幅が決定されることを示した。さらに、モデルに特性長が導入されたことで本モデルによる寸法効果の表現が可能なことを述べた。また、LPSO相多結晶に対するFEM解析を実施し、高次理論で新たに導入される結晶粒界上の境界条件の変形への影響を粒界に蓄積したGN転位密度および背応力場形成の観点から検討した。最後に、キンク帯を特徴づける回位四重極構造の結晶塑性論的表現方法について述べた。

以上の検討から以下の結言を得た。

- (1) GN転位の存在に起因したすべり面の曲率を考慮して、従来のSS転位密度モデルを拡張することで従来の転位-結晶塑性モデルを高次応力を考慮した理論体系に内包することが可能となる。
- (2) 本モデルを用いたFEM解析では、スケール比が $10^{-3}$  オーダ程度と比較的小さな場合でもキンク変形のメッシュ依存性を取り除くことができる。また、形成するキンク帯の幅は特性長により決定される。さらに、本モデルにより試験片サイズが小さいほど強度が向上するという寸法効果を表現できる。
- (3) 結晶粒界においてすべりを拘束した場合、粒界にGN転位が堆積することで大きな背応力場を形成する。この背応力場が変形の抵抗となるため、公称応力は粒界ですべりを自由とした場合に比べて大きくなる。また、応力を緩和するために粒界近傍において錐面系の活動が活発となる。一方、粒界においてすべりを自由とした場合には、応力の緩和が底面すべりによ

て十分になされるため、錐面系の活動は小さなものとなる。

- (4) すべりの不適合度を用いることでキンク帯における回位四重極構造を定性的に表現できる。ただし、数値計算において GN 転位密度の値を節点に外挿する際に、境界における GN 転位の流入を考慮することで自由表面上の GN 転位密度値を零に設定する必要がある。

## 8.2 今後の課題と展開

最後に、本研究に残された課題および今後の展開について述べる。

### 8.2.1 特性長とキンク帯幅の関係および LPSO 相の特性長の同定

7.2 節で述べたように、特性長が形成するキンク帯の幅を決定する。しかしながら、それらの量との間の数値的な関連性は詳細には解明できておらず、今後モデルの体系から数学的にその関係を導出する必要がある。また、それらの関連性からキンク帯の幅に関する実験結果に基づいて LPSO 相固有の特性長の具体値を同定することが望まれる。

### 8.2.2 多結晶における粒界の境界条件とキンク変形

7.3 節で述べたように、本解析で用いた多結晶試験片におけるキンク変形の様相は結晶粒界のすべりの境界条件に依存していない。この原因には結晶粒界の数が少なすぎるため、キンク変形のトリガーとなり得る初期不整が材料内部に存在しなかったためなどが考えられる。そこで今後は、より多数の結晶粒で構成され、かつ結晶の表面粗さ、初期結晶方位のばらつきなどを含む実材料をより模した多結晶モデルに対する解析を実施し、粒界の境界条件がキンク帯形成に与える影響の詳細な調査が期待される。

### 8.2.3 二相合金への応用

1 章で述べたように、LPSO 型 Mg 合金の材料強化は LPSO 相のキンク変形およびそれに起因した  $\alpha$ -Mg 相の動的再結晶化現象により果たされる。本研究では理論の過度の複雑さを避けるために解析モデルには  $\alpha$ -Mg 相を選択しなかったが、合金の材料強化を全般的に表現するためにも LPSO 相のキンク変形と  $\alpha$ -Mg 相の動的再結晶を連動させた解析の実施が望まれる。それにより一連の材料強化現象を数値解析的に再現することができれば、LPSO 型 Mg 合金の材料生成プロセスの最適化を計算力学的立場から提案することが可能となる。



## 謝辞

本研究は、著者が慶應義塾大学大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻に在籍中に、本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻マルチディシプリナリ・デザイン科学専修志澤一之教授のご指導のもとで行ったものであり、学部時代から現在に至る6年間の長きにわたる研究生活において同教授より賜りました熱心なご指導、ご鞭撻に対して厚く御礼申し上げます。6年前の研究室見学の折に、初めて教授とお話しさせて頂いたことを今でも鮮明に覚えております。ご親切かつ熱心に研究内容を紹介して下さい、研究ならびに学問に真摯に向き合うそのご姿勢に魅かれたことが当研究室を志望した決め手となりました。そのおかげで充実した6年にわたる研究生活を送ることができ誠に感謝しております。また、常に学生のことを一番に考えて下さり、ご多忙の折にも何とか時間を割いて我々の面倒を見て下さる教授のお姿に、単なる指導教授と学生という垣根を超えた深い絆のようなものを勝手ながら感じておりました。今後は、教授のそのお姿をご参考にさせて頂き、研究者として技術の発展に邁進する所存です。

本論文の作成にあたり、ご査読頂き、また有益な討論ならびに貴重なご意見を賜りました本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻マルチディシプリナリ・デザイン科学専修所属小茂鳥潤教授、同研究科総合デザイン工学専攻システム統合工学専修所属大家哲朗専任講師ならびに同研究科開放環境科学専攻環境エネルギー科学専修所属鈴木哲也教授に深謝いたします。小茂鳥教授からは金属の腐食などに関する材料工学の知見を、大家専任講師からは解析モデルの選定に関する数値解析の知見を、鈴木教授からはキンク変形に関連した破壊の知見などをご教授頂き、本論文の内容をより充実化することができました。

本研究の遂行にあたり、多大なるご協力を賜りました佐賀大学大学院工学系研究科機械システム工学専攻機械システム工学講座所属只野裕一准教授ならびに熊本大学大学院先端機構所属眞山剛准教授に深く御礼申し上げます。特に有限要素法および結晶塑性論に関する多くのご助言、ご指導を頂きました。また、北見工業大学工学部機械工学科計算力学研究室所属大橋鉄也教授からは転位-結晶塑性モデルの物理的描像や理論展開の考え方など数多くの知見、ご助言を受け賜りました。心より感謝申し上げます。名古屋大学大学院理工学研究科計算理工学専攻所属奥村大准教授からは高次理論における数値解析手法について大変貴重なご助言を頂き、本論文におけるFEM解析の実施になくはならないものでした。ご多忙にも関わらず討論のお時間をとって頂き、誠に有難うございました。

新学術領域研究においてお世話になりました大阪大学大学院理工学研究科知能・機能創成工学専攻所属中谷彰宏教授、熊本大学大学院自然科学研究科産業創造工学専攻所属高島和希教授ならびに京都大学大学院理工学研究科材料工学専攻所属岸田恭輔准教授に深謝いたします。LPSO相の実験的知見および数理モデルに関して多くを学ばせて頂きました。

また、著者が学部生の頃から有益なご助言を賜った当時慶應義塾大学大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻黒澤瑛介博士、村松眞由博士ならびに近藤瑠歩博士には厚く御礼申し上げます。問題に取り組む真摯な姿勢や解決に至る手法など多くを学ばせて頂き、研究者として技術的にも精神的にも大きく成長することが出来ました。黒澤博士とは研究室内の数少ない喫煙者としてたばこコミュニケーションをとらせて頂き、喫煙所にて数々のご指導ならびにご相談にのって頂いたことを今後忘れません。村松博士には研究に対するストイックなご姿勢を学ばせて頂き、また国内外の学会において大変お世話になりました。また、同氏の卓越したコミュニケーション能力を今後是非ともご参考にさせて頂きたいと思っております。近藤博士は当時著者と同じ研究班に所属されていたことから、本当に多くのことを学ばせて頂きました。研究活動だけでなく授業、就職活動、放課のアルコール活動などで大変お世話になり、心より感謝しております。

同期として6年間の研究室生活において苦楽を共にし、互いに切磋琢磨した原英之氏に深謝いたします。常に私のお手本のような存在であり、その姿勢に多くを学ばせて頂きました。修士課程までの3年間を共に過ごした長津輝氏ならびに能條和成氏、学部の1年間を共に過ごした林英輝氏には心より感謝いたします。同氏ら同期のおかげで飲み会や合宿など多くの楽しい思い出を作ることができました。また、これまでに研究室生活を共に過ごしました鈴木航氏、水澤文彦氏、中重齊氏、Maël Stephan氏、小野貴裕氏、佐藤慎一氏、三根啓吾氏、壁谷卓未氏、横山晃彦氏、石垣文彦氏、梶谷聡氏、石樽達也氏、田尻聡太郎氏、中村亮介氏、丸田祐介氏、御園生大介氏、茂木俊和氏、古屋貴大氏、佐々木文章氏、小紫知慧氏、谷本遼氏、河合利洋氏、丸山康太氏、知場啓志氏、菅原崇人氏、鯨井翔氏、池田恵子氏、宇塚友亮氏、小笠原鵬人氏、木村祐一氏ならびに萩原康仁氏に感謝いたします。石垣氏とは実験レポートなどを徹夜して書き上げたことは今では良い思い出です。田尻氏は下宿先が近いことから頻繁に鍋をつつき、研究および私生活に関する持論を交わし合ったことで研究者ならびに人間として成長できたと感じております。茂木氏にはいつも美味しい珈琲を入れて頂き感謝いたします。

末筆ながら、著者をここまで養い、進学を理解してくれた家族に心より感謝いたします。

2015年11月 矢上台の研究室にて

著者

上田 亮

## 参考文献

- (1) 日本マグネシウム協会編, 現場で生かす金属材料シリーズマグネシウム, (2011), 丸善.
- (2) 里達雄, 軽合金材料, (2011), コロナ社.
- (3) 小島陽・伊藤忠雄, マグネシウム合金の製造と応用, (2001), シーエムシー出版.
- (4) Kainer, K.U., *Magnesium - Alloys and technology*, (2003), Wiley-VCH.
- (5) 小島陽・鎌土重晴・東健司・相澤龍彦, “高性能マグネシウムの新展開”, *軽金属*, Vol. 51, No. 11(2001), pp. 575–585.
- (6) Leontis, T.E., in Spedding, F.H. and Daane, A.H. ed., *The Rare Earths*, (1961), Wiley.
- (7) Luo, Z.P. and Zhang, S.Q., “High-resolution electron microscopy on the X-Mg<sub>12</sub>ZnY phase in a high strength Mg-Zn-Y magnesium alloy”, *Journal of Materials Science Letters*, Vol. 19, (2000), pp. 813–815.
- (8) Kawamura, Y., Hayashi, K., Inoue, A. and Masumoto, T., “Rapidly solidified powder metallurgy Mg<sub>97</sub>Zn<sub>1</sub>Y<sub>2</sub> alloys with excellent tensile yield strength above 600 MPa”, *Materials Transactions*, Vol. 42, No. 7(2001), pp. 1172–1176.
- (9) Inoue, A., Kawamura, Y., Matsushita, M., Hayashi, K. and Koike, J., “Novel hexagonal structure and ultrahigh strength of magnesium solid solution in the Mg-Zn-Y system”, *Journal of Materials*, Vol. 16, No. 7(2001), pp. 1894–1900.
- (10) 河村能人, “LPSO型マグネシウム合金の特徴と今後の展望”, *まてりあ*, Vol. 54, No. 2(2015), pp. 44–49.
- (11) 河村能人, “マグネシウム新時代に向けた高性能化～KUMADAI マグネシウム合金～”, *素形材*, Vol. 55, No. 6(2014), pp. 32–38.
- (12) 河村能人, “長周期積層構造相を強化相にした高強度・高耐熱マグネシウム合金”, *金属*, Vol. 80, No. 7(2010), pp. 581–588.
- (13) Itoi, T., Seimiya, T., Kawamura, Y. and Hirohashi, M., “Long period stacking structures observed in Mg<sub>97</sub>Zn<sub>1</sub>Y<sub>2</sub> alloy”, *Scripta Materialia*, Vol. 51, (2004), pp. 107–111.
- (14) Yamasaki, M., Anan, T., Yoshimoto, S. and Kawamura, Y., “Mechanical properties of warm-extruded Mg-Zn-Gd alloy with coherent 14H long periodic stacking ordered structure precipitate”, *Scripta Materialia*, Vol. 53, (2005), pp. 799–803.
- (15) Yoshimoto, S., Yamasaki, M. and Kawamura, Y., “Microstructure and mechanical properties of extruded Mg-Zn-Y alloys with 14H long period ordered structure”, *Materials Transactions*, Vol. 47, No. 4(2006), pp. 959–965.
- (16) Morikawa, T., Kaneko, K., Higashida, K., Kinoshita, D., Takenaka, M. and Kawamura, Y., “The fine-grained structure in magnesium alloy containing long-period stacking order phase”, *Materials Transac-*

- tions, Vol. 49, No. 6(2008), pp. 1294–1297.
- (17) Hagihara, K., Kinoshita, A., Sugino, Y., Yamasaki, M., Kawamura, Y., Yasuda, H.Y. and Umakoshi, Y., “Plastic deformation behavior of Mg<sub>97</sub>Zn<sub>1</sub>Y<sub>2</sub> extruded alloys”, *Trans. nonferrous met. Soc. China*, Vol. 20, (2010), pp. 1259–1268.
- (18) Abe, E., Kawamura, Y., Hayashi, K. and Inoue, A., “Long-period stacking ordered structure in a high-strength nanocrystalline Mg-1 at% Zn-2 at% Y alloy studied by atomic-resolution Z-contrast STEM”, *Acta Materialia*, Vol. 50, (2002), pp. 3845–3857.
- (19) Hagihara, K., Tanaka, T., Izuno, H., Umakoshi, Y. and Nakano, T., “Non-basal slip in Ni<sub>3</sub>(Ti, Nb) and Ni<sub>3</sub>(Ti, Al) single crystals with various long-period stacking ordered structures”, *Acta Materialia*, Vol. 61, (2013), pp. 4365–4373.
- (20) 小原嗣朗, 基礎から学ぶ金属材料, (2012), 朝倉書店.
- (21) 吉永日出男, 稠密六方晶金属の変形双晶, (2007), 内田老鶴園.
- (22) Abe, E., Ono, A., Itoi, T., Yamasaki, M. and Kawamura, Y., “Polytypes of long-period stacking structures synchronized with chemical order in a dilute Mg-Zn-Y alloy”, *Philosophical Magazine Letters*, Vol. 91, No. 10(2011), pp. 690–696.
- (23) Egusa, D. and Abe, E., “The structure of long period stacking/order Mg-Zn-RE phases eith extended non-stoichiometry ranges”, *Acta Materialia*, Vol. 60, (2012), pp. 166–178.
- (24) 河村能人・大河内均・関川貴洋・関義和, “急速凝固法による長周期積層構造型ナノ結晶マグネシウム合金”, *金属*, Vol. 80, No. 8(2010), pp. 623–630.
- (25) Shao, X.H., Yang, Z.Q. and Ma, X.L., “Strengthening and toughening mechanisms in Mg-Zn-Y alloy with a long period stacking ordered structure”, *Acta Materialia*, Vol. 58, (2010), pp. 4760–4771.
- (26) Hagihara, K., Kinoshita, A., Sugino, Y., Yamasaki, M., Kawamura, Y., Yasuda, H.Y. and Umakoshi, Y., “Effect of long-period stacking ordered phase on mechanical properties of Mg<sub>97</sub>Zn<sub>1</sub>Y<sub>2</sub> extruded alloy”, *Acta Materialia*, Vol. 58, (2010), pp. 6282–6293.
- (27) Hagihara, K., Yokotani, N. and Umakoshi, Y., “Plastic deformation behavior of Mg<sub>12</sub>YZn with 18R long-period stacking ordered structure”, *Intermetallics*, Vol. 18, (2010), pp. 267–276.
- (28) Kawamura, Y. and Yamasaki, M., “Formation and mechanical properties of Mg<sub>97</sub>Zn<sub>1</sub>RE<sub>2</sub> alloys with long-period stacking ordered structure”, *Materials Transactions*, Vol. 48, No. 11(2007), pp. 2986–2992.
- (29) Kawamura, Y., Kasahara, T., Izumi, S. and Yamasaki, M., “Elevated temperature Mg<sub>97</sub>Y<sub>2</sub>Cu<sub>1</sub> alloy with long period ordered structure”, *Scripta Materialia*, Vol. 55, (2006), pp. 453–456.
- (30) Roberts, C.S., *Magnesium and its Alloys*, (1960), Wiley.
- (31) Partridge, P.G., “The crystallography and deformation modes of hexagonal close-packed metals”, *Metallurgical Reviews*, Vol. 118, (1967), pp. 169–194.
- (32) Yoshinaga, H. and Horiuchi, R., “Deformation mechanisms in magnesium single crystals compressed in the direction parallel to hexagonal axis”, *Transactions of the JIM*, Vol. 4, (1963), pp. 1–8.
- (33) Ando, S. and Tonda, H., “Non-basal slip in magnesium-lithium alloy single crystals”, *Materials Transactions, JIM*, Vol. 41, (2000), pp. 1188–1191.
- (34) Matsuda, M., Li, S., Kawamura, Y., Ikuhara, Y. and Nishida, M., “Interaction between long period stacking order phase and deformation twin in rapidly solidified Mg<sub>97</sub>Zn<sub>1</sub>Y<sub>2</sub> alloy”, *Materials Science and Engineer-*

- ing A*, Vol. 386, (2004), pp. 447–452.
- (35) 岸田恭輔・乾晴行, “Mg-TM-RE 系 LPSO 金属間化合物の結晶構造と変形”, 日本学術会議材料工学連合講演会講演論文集, Vol. 57, (2013), pp. 197–198.
- (36) Kishida, K., Inoue, A., Yokobayashi, H. and Inui, H., “Deformation twinning in a Mg-Al-Gd ternary alloy containing precipitates with long-period stacking-ordered(LPSO)structure”, *Scripta Materialia*, Vol. 89, (2014), pp. 25–28.
- (37) 高島和希・峯洋二, “マイクロ材料試験による Mg-Zn-Y 合金 LPSO 相単結晶の変形・破壊挙動の解明”, 日本学術会議材料工学連合講演会講演論文集, Vol. 58, (2014), pp. 127–128.
- (38) Hagihara, K., Fukusumi, Y., Yamasaki, M., Nakano, T. and Kawamura, Y., “Non-basal slip systems operative in Mg<sub>12</sub>ZnY long-period stacking ordered(LPSO) phase with 18R and 14H structures”, *Materials Transactions*, Vol. 54, No. 5(2013), pp. 693–697.
- (39) Wu, S., Zhang, J., Zhang, Z., Xu, C. and Nie, K., “A high strength and good ductility Mg-Y-Ni-Ti alloy with long period stacking ordered structure processed by hot rolling and aging treatment”, *Materials Science & Engineering A*, Vol. 648, (2015), pp. 134–139.
- (40) Orowan, E., “A type of plastic deformation new in metals”, *Nature*, Vol. 149, (1942), pp. 643–644.
- (41) Hess, J.B. and Barrett, C.S., “Structure and nature of kink bands in zinc”, *Metals Transactions*, Vol. 185, (1949), pp. 599–606.
- (42) Suematsu, H., Suzuki, T. and Iseki, T., “Kinking and cracking caused by slip in single crystals of silicon carbide”, *Journal of the American Ceramic Society*, Vol. 74, No. 1(1991), pp. 173–178.
- (43) Barsoum, M.W., Farber, L. and El-Raghy, T., “Dislocations, kink bands, and room-temperature plasticity of Ti<sub>3</sub>SiC<sub>2</sub>”, *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 30A, (1999), pp. 1727–1738.
- (44) Mukai, T., Yamanoi, M., Watanabe, H. and Higashi, K., “Ductility enhancement in AZ31 magnesium alloy by controlling its grain structure”, *Scripta Materialia*, Vol. 45, (2001), pp. 89–94.
- (45) Agnew, S.R., Horton, J.A., Lillo, T.M. and Brown, D.W., “Enhanced ductility in strongly textured magnesium produced by equal channel angular processing”, *Scripta Materialia*, Vol. 50, (2004), pp. 377–381.
- (46) Mehrotra, P., Lillo, T.M. and Agnew, S.R., “Ductility enhancement of a heat-treatable magnesium alloy”, *Scripta Materialia*, Vol. 55, (2006), pp. 855–858.
- (47) Yamasaki, M., Hashimoto, K., Hagihara, K. and Kawamura, Y., “Effect of multimodal microstructure evolution on mechanical properties of Mg-Zn-Y extruded alloy”, *Acta Materialia*, Vol. 59, (2011), pp. 3646–3658.
- (48) Romanov, A.E. and Vladimirov, V.I., in Nabarro, F.R.N. ed., *Dislocations in Solids*, Vol. 9, (1992), North-Holland.
- (49) Hagihara, K., Kinoshita, A., Sugino, Y., Yamasaki, M., Kawamura, Y., Yasuda, H.Y. and Umakoshi, Y., “Plastic deformation behavior of Mg<sub>89</sub>Zn<sub>4</sub>Y<sub>7</sub> extruded alloy composed of long-period stacking ordered phase”, *Intermetallics*, Vol. 18, (2010), pp. 1079–1085.
- (50) Egusa, D., Yamasaki, M., Kawamura, Y. and Abe, E., “Micro-kinking of the long-period stacking/order (LPSO) phase in a hot-extruded Mg<sub>97</sub>Y<sub>2</sub>Zn<sub>1</sub> alloy”, *Materials Transactions*, Vol. 54, No. 5(2013), pp. 698–702.
- (51) Asaro, R.J. and Lubarda, V.A., *Mechanics of Solids and Materials*, (2006), Cambridge University Press.



- (52) Roters, F., Eisenlohr, P., Bieler, T.R. and Raabe, D., *Crystal Plasticity Finite Element Methods: in Materials Science and Engineering*, (2010), Wiley-VCH.
- (53) Gurtin, M.E., Fried, E. and Anand, L., *The Mechanics and Thermodynamics of Continua*, (2010), Cambridge University Press.
- (54) Mayama, T., Ohashi, T., Tadano, Y. and Hagihara, K., “Crystal plasticity analysis of development of intragranular misorientations due to kinking in HCP single crystals subjected to uniaxial compressive loading”, *Materials Transactions*, Vol. 56, No. 7(2015), pp. 963–972.
- (55) Matsumoto, R., Uranagase, M. and Miyazaki, N., “Molecular dynamics analyses of deformation behavior of long-period-stacking-ordered structures”, *Materials Transactions*, Vol. 54, No. 5(2013), pp. 686–692.
- (56) Lei, X.W. and Nakatani, A., “A deformation mechanics for ridge-shaped kink structure in layered solids”, *Transactions of the ASME, Journal of Applied Mechanics*, Vol. 82, No. 7(2015), pp. 1–6.
- (57) Agnew, S.R., Yoo, M.H. and Tomé, C.N., “Application of texture simulation to understanding mechanical behavior of Mg and solid solution alloys containing Li or Y”, *Acta Materialia*, Vol. 49, (2001), pp. 4277–4289.
- (58) Yi, S.-B., Davies C.H.J., Brokmeier, H.-G., Bolmaro, R.E., Kainer, K.U. and Homeyer, J., “Deformation and texture evolution in AZ31 magnesium alloy during uniaxial loading”, *Acta Materialia*, Vol. 54, (2006), pp. 549–562.
- (59) Graff, S., Brocks, W. and Steglich, D., “Yielding of magnesium: From single crystal to polycrystalline aggregates”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 23, (2007), pp. 1957–1978.
- (60) 近藤瑠歩・只野裕一・志澤一之, “双晶の組織形成を考慮した HCP 結晶に対する転位-結晶塑性モデリングおよびシミュレーション”, 日本機械学会論文集, A 編, Vol. 78, No. 792(2012), pp. 1157–1172.
- (61) Ohashi, T., “Numerical modelling of plastic multislip in metal crystals of f.c.c. type”, *Philosophical Magazine*, Vol. 70, No. 5(1994), pp. 793–803.
- (62) Aoyagi, Y. and Shizawa, K., “Multiscale crystal plasticity modeling based on geometrically necessary crystal defects and simulation on fine-graining for polycrystal”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 23, (2007), pp. 1022–1040.
- (63) Anand, L., Aslan, O. and Chester, S.A., “A large-deformation gradient theory for elastic-plastic materials: strain softening and regularization of shear bands”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 30-31, (2012), pp. 116–143.
- (64) 社団法人土木学会 応用力学委員会・計算力学小委員会 編, いまさら聞けない計算力学の常識, (2008), 丸善.
- (65) Kuroda, M. and Tvergaard, V., “Studies of scale dependent crystal viscoplasticity models”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 54, (2006), pp. 1789–1810.
- (66) Aifantis, E.C., “The physics of plastic deformation”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 3, (1987), pp. 211–247.
- (67) Fleck, N.A. and Hutchinson, J.W., “Strain gradient plasticity”, *Advances in applied mechanics*, Vol. 33, (1997), pp. 295–361.
- (68) Forest, S. and Sievert, R., “Nonlinear microstrain theories”, *International Journal of Solids and Structures*,

- Vol. 43, No. 24(2006), pp. 7224–7245.
- (69) Gurtin, M.E., “A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for geometrically necessary dislocations”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 50, (2002), pp. 5–32.
- (70) Bittencourt, E., Needleman, A., Gurtin, M.E. and Van der Giessen, E., “A comparison of nonlocal continuum and discrete dislocation plasticity predictions”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 51, (2003), pp. 281–310.
- (71) 木村宏, 材料強度の考え方, (1998), アグネ技術センター.
- (72) Fleck, N.A., Muller, G.M., Ashby, M.F. and Hutchinson, J.W., “Strain gradient plasticity: theory and experiment”, *Acta Metallurgica et Materialia*, Vol. 42, No. 2(1994), pp. 475–487.
- (73) Parthasarathy, T.A., Rao, S.I., Dimiduk, D.M. Uchic, M.D. and Trinkle, D.R., “Contribution to size effect of yield strength from the stochastics of dislocation source lengths in finite samples”, *Scripta Materialia*, Vol. 56, (2007), pp. 313–316.
- (74) Kondo, R., Tadano, Y. and Shizawa, K., “A phase-field model of twinning and detwinning coupled with dislocation-based crystal plasticity for HCP metals”, *Computational Materials Science*, Vol. 951, (2014), pp. 672–683.
- (75) Shizawa, K. and Zbib, H.M., “A thermodynamical theory of gradient elastoplasticity with dislocation density tensor. I: Fundamentals”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 15, No. 9(1999), pp. 899–938.
- (76) Forest, S., Cailletaud, G. and Sievert, R., “A Cosserat theory for elastoviscoplastic single crystals at finite deformation”, *Archives of Mechanics*, Vol. 49, No. 4(1997), pp. 705–736.
- (77) 橋口公一, 最新弾塑性学, (1990), 朝倉書店.
- (78) Marsden, J.E. and Hughes, T.J.R., *Mathematical Foundations of Elasticity*, (1994), Dover Publications, Newyork.
- (79) Holzapfel, G.A., *Nonlinear Solid Mechanics*, (2000), Wiley.
- (80) Reddy, J.N., *An introduction to continuum mechanics*, (2013), Cambridge University Press.
- (81) Clayton, J.D., *Nonlinear Mechanics of Crystals*, (2011), Springer.
- (82) Shizawa, K., “Thermomechanical derivation of noncoaxial plastic constitutive equations considering spins of objective stress rates”, *JSME Int. J. Series A*, Vol. 40, No. 3(1997), p. 336.
- (83) Rice, J.R., “Inelastic constitutive relations for solids: an internal-variable theory and its application to metal plasticity”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 19, (1971), pp. 433–455.
- (84) Ashby, M.F., “The deformation of plastically non-homogeneous materials”, *Philosophical Magazine*, Vol. 21, No. 170(1970), pp. 399–424.
- (85) 近藤一夫, “連続転位分布理論—不完全連続体の幾何学—”, 日本金属学会会報, Vol. 10, No. 12(1971), pp. 787–793.
- (86) 大南正瑛, マイクロメカニクス入門, (1980), オーム社.
- (87) 加藤雅治, 入門転位論, (1999), 裳華房.
- (88) Kröner, E., *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen*, (1958), Springer-Verlag.
- (89) Cermelli, P. and Gurtin, M.E., “On the characterization of geometrically necessary dislocations in finite plasticity”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 49, (2001), pp. 1539–1568.
- (90) Steinmann, P., “Views on multiplicative elastoplasticity and the continuum theory of dislocations”, *Inter-*



- national Journal of Engineering Science*, Vol. 34, No. 15(1996), pp. 1717–1735.
- (91) Gurtin, M.E., “The Burgers vector and the flow of screw and edge dislocations in finite-deformation single-crystal plasticity”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 54, (2006), pp. 1882–1898.
- (92) Arsenlis, A. and Parks, D.M., “Crystallographic aspects of geometrically-necessary and statistically-stored dislocation density”, *Acta Materialia*, Vol. 47, No. 5(1999), pp. 1597–1611.
- (93) 黒澤瑛介. FCC 超微細粒金属の力学特性に関するトリプルスケール転位-結晶塑性モデリングおよび大変形 FEM シミュレーション. PhD thesis, 慶應義塾大学, (2010).
- (94) Ohno, N. and Okumura, D., “Higher-order stress and grain size effects due to self-energy of geometrically necessary dislocations”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 55, (2007), pp. 1879–1898.
- (95) Ohashi, T., “Computer simulation of non-uniform multiple slip in face centered cubic bicrystals”, *Transactions of the Japan Institute of Metals*, Vol. 28, No. 11(1997), pp. 906–915.
- (96) Kocks, U.F., “Laws for work-hardening and low-temperature creep”, *Journal of Engineering Materials and Technology, Transactions of the AIME*, Vol. 98, (1976), pp. 76–85.
- (97) 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, Vol. 68, No. 675(2002), pp. 1490–1497.
- (98) Essmann, U. and Mughrabi, H., “Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities”, *Philosophical Magazine A*, Vol. 40, No. 6(1979), pp. 731–756.
- (99) Han, W. and Reddy, B.D., *Plasticity: mathematical theory and numerical analysis*, Vol. 9, (2012), Springer Science & Business Media.
- (100) 棚橋隆彦, 連続体の力学 (3)–物質の構成方程式–, (1986), 理工図書.
- (101) Maugin, G.A., *The Thermomechanics of Plasticity and Fracture*, (1992), Cambridge University Press.
- (102) 村上大介・小林誠一・鳥垣俊和・志澤一之, “ポリマの粘塑性大変形挙動に関する熱・力学的モデリングとシミュレーション (第 1 報, ひずみ速度依存性に由来する構成式の非共軸性)”, 日本機械学会論文集, A 編, Vol. 68, No. 668(2002), pp. 674–681.
- (103) 久田俊明, 非線形有限要素法のためのテンソル解析の基礎, (1992), 丸善.
- (104) Gurtin, M.E., “A finite-deformation, gradient theory of single-crystal plasticity with free energy dependent on densities of geometrically necessary dislocations”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 24, (2008), pp. 702–725.
- (105) 棚橋隆彦, 連続体の力学 (2)–一般原理とその応用–, (1986), 理工図書.
- (106) 村上澄男, 連続体損傷力学, (2008), 森北出版.
- (107) Coleman, B.D. and Gurtin, M.E., “Thermodynamics with internal state variables”, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 47, (1967), pp. 597–613.
- (108) 中曾根祐司・田中純夫・木村清和・黒瀬雅詞・鈴木拓雄・宮川睦巳・志村穰・佐々木徹, 異方性材料の弾性論, (2014), コロナ社.
- (109) Asaro, R.J., “Geometrical effects in the inhomogeneous deformation of ductile single crystals”, *Acta Metallurgica*, Vol. 27, (1979), pp. 445–453.
- (110) Nemat-Nasser, S., “On finite plastic flow of crystalline solids and geomaterials”, *Transactions of the ASME, Journal of Applied Mechanics*, Vol. 50, (1983), pp. 1114–1126.
- (111) Evers, L.P., Brekelmans, W.A.M. and Geers, M.G.D., “Non-local crystal plasticity model with intrinsic

- SSD and GND effects”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 52, (2004), pp. 2379–2401.
- (112) Bayley, C.J., Brekelmans, W.A.M. and Geers, M.G.D., “A comparison of dislocation induced back stress formulations in strain gradient crystal plasticity”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 43, (2006), pp. 7268–7286.
- (113) Suzuki, K., Matsuki, Y., Masaki, K., Sato, M. and Kuroda, M., “Tensile and microbend tests of pure aluminum foils with different thicknesses”, *Materials Science and Engineering A*, Vol. 513-514, (2009), pp. 77–82.
- (114) Hayashi, I., Sato, M. and Kuroda, M., “Strain hardening in bent copper foils”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 59, (2011), pp. 1731–1751.
- (115) Keller, C., Hug, E., Habraken, A.M. and Duchene, L., “Finite element analysis of the free surface effects on the mechanical behavior of thin nickel polycrystals”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 29, (2012), pp. 155–172.
- (116) Hutchinson, J.W., “Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials”, *Proceedings of the Royal Society of London A*, Vol. 348, (1976), pp. 101–127.
- (117) Pan, J. and Rice, J.R., “Rate sensitivity of plastic flow and implications for yield-surface vertices”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 19, No. 11(1983), pp. 973–987.
- (118) 近藤 瑠歩. Multi-phase-field モデルおよび転位-結晶塑性モデルを用いた双晶組織変化を伴う純 Mg の塑性変形挙動のモデル化とその均質化 FEM 解析. PhD thesis, 慶應義塾大学, (2014).
- (119) Ohashi, T., “Crystal plasticity analysis of dislocation emission from micro voids”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 21, (2005), pp. 2071–2088.
- (120) Asaro, R.J., “Crystal plasticity”, *Transactions of the ASME, Journal of Applied Mechanics*, Vol. 50, No. 4b(1983), pp. 921–934.
- (121) Gurtin, M.E., “On the plasticity of single crystals: free energy, microforces, plastic-strain gradients”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 48, (2000), pp. 989–1036.
- (122) Kuroda, M. and Tvergaard, V., “On the formulations of higher-order strain gradient crystal plasticity models”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 56, (2008), pp. 1591–1608.
- (123) Okumura, D., Higashi, Y., Sumida, K. and Ohno, N., “A homogenization theory of strain gradient single crystal plasticity and its finite element discretization”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 23, (2007), pp. 1148–1166.
- (124) Peirce, D., Asaro, R.J. and Needleman, A., “Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids”, *Acta Metallurgica*, Vol. 31, No. 12(1983), pp. 1951–1976.
- (125) Peirce, D., Shih C.F. and Needleman, A., “A tangent modulus method for rate dependent solids”, *Computers & Structures*, Vol. 18, No. 5(1984), pp. 875–887.
- (126) フィッシュユ, J.・ベリーツチコ, T. 著・山田貴博監訳・永井学志・松井和己訳, 有限要素法 ABAQUS Student Edition 付, (2008), 丸善.
- (127) 久田俊明・野口裕久, 非線形有限要素法の基礎と応用, (1995), 丸善.
- (128) Reddy, J.N., *An Introduction to the Finite Element Method, Third Edition*, (2006), McGraw-Hill.
- (129) Zienkiewicz, O.C., Taylor, R.L. and Fox, D.D., *The Finite Element Method for Solid & Structural Mechanics, Seventh Edition*, (2014), Elsevier.

- (130) 黒田充紀・志澤一之, “結晶塑性の理論と応用-結晶の大変形から転位蓄積まで-”, 塑性と加工, Vol. 43, No. 495(2002), pp. 299–309.
- (131) 社団法人日本塑性加工学会 編, 非線形有限要素法-線形弾性解析から塑性加工解析まで-, (1994), コロナ社.
- (132) 後藤學, 実践有限要素法-大変形弾塑性解析-, (1995), コロナ社.
- (133) Tane, M., Nagai, Y., Kimizuka, H., Hagihara, K. and Kawamura, Y., “Elastic properties of an Mg-Zn-Y alloy single crystal with a long-period stacking-ordered structure”, *Acta Materialia*, Vol. 61, (2013), pp. 6338–6351.
- (134) Yoo, M.H., “Slip, twinning, and fracture in hexagonal close-packed metals”, *Metallurgical Transactions A*, Vol. 12, (1981), pp. 409–418.
- (135) Bhattacharya, B. and Niewczas, M., “Work-hardening behaviour of Mg single crystals oriented for basal slip”, *Philosophical Magazine*, Vol. 91, No. 17(2011), pp. 2227–2247.
- (136) de Wit, R., in Simmons, J.A., deWit, R. and Bullough, R. ed., *Fundamental Aspects of Dislocation Theory* Vol. 1, (1970), National Bureau of Standards, Washington, D.C., pp.651-673.
- (137) Eremeyev, V.A., Lebedev, L.P. and Altenbach, H., *Foundations of Micropolar Mechanics*, (2012), Springer.
- (138) Busso, E.P., Meisssonier, F.T. and O’Dowd, N.P., “Gradient-dependent deformation of two-phase single crystals”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 48, (2000), pp. 2333–2361.
- (139) Kuroda, M. and Tvergaard, V., “A finite deformation theory of higher-order gradient crystal plasticity”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 56, (2008), pp. 2573–2584.
- (140) Kuroda, M., “On large-strain finite element solutions of higher-order gradient crystal plasticity”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 48, (2011), pp. 3382–3394.

## 本研究に関する原著論文および口頭発表

### 1. 定期刊行誌掲載論文(主論文に関連する原著論文)

- (1) 上田亮, 志澤一之, “Mg 基 LPSO 相単結晶におけるキンク帯形成の転位-結晶塑性シミュレーション”, 材料, Vol. 64, No. 4, pp. 295-302, (2015).
- (2) 上田亮, 志澤一之, “転位-結晶塑性シミュレーションによる Mg 基 LPSO 相単結晶におけるキンク帯形成位置の検討”, 材料, Vol. 65, No. 3, (2016), 掲載決定.

### 2. 定期刊行誌掲載論文(その他の論文)

なし.

### 3. 国際会議論文(査読付きの full-length papers)

- (1) Ueta, R.\* and Shizawa, K., “A Dislocation-based Crystal Plasticity Simulation on Kink Band Formation and Evolution in Polycrystalline Mg Alloy with LPSO Phase”, Key Engineering Materials, (AEPA 2014, Kaohsiung, Taiwan), Vol. 626, pp. 281-286, (2015).

### 4. その他の国際会議発表

- (1) Ueta, R.\*, Tadano, Y. and Shizawa, K., “An Investigation on Mechanism of Kink-band Formation in Mg-based LPSO-phase by Dislocation-crystal Plasticity FE Analysis”, International Symposium on Long-Period Stacking Ordered Structure and Its Related Materials 2012, (LPSO2012, Sapporo, Japan), Oral-03, (2012).
- (2) Ueta, R.\*, Tadano, Y. and Shizawa, K., “A Dislocation-based Crystal Plasticity FE Analysis on Mechanisms of Kink Band Formation in Mg-based LPSO Phase”, Abstracts of 5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics, (APCOM 2013, Singapore, Republic of Singapore), 1393, (2013).
- (3) Ueta, R.\* and Shizawa, K., “A Dislocation-based Crystal Plasticity Simulation on Kink Band Formation and Evolution in Polycrystalline Mg Alloy with LPSO Phase, Abstracts of 12th Asia-Pacific Conference on Engineering Plasticity and Its Applications, (AEPA2014, Kaohsiung, Taiwan), p.93, (2014).
- (4) Ueta, R.\*, Ikeda, K. and Shizawa, K., “A Dislocation-based Crystal Plasticity FE Analysis for a Single Crystal and Polycrystal of a Mg-based LPSO Phase”, The 2nd International Symposium on Long-Period Stacking Ordered Structure and Its Related Materials (LPSO2014, Kumamoto, Japan), 77, (2014).

### 5. 国内学会発表

- (1) 上田亮\*, 近藤瑠歩, 只野裕一, 志澤一之, “LPSO 型 Mg 単相におけるキンクバンド形成の GN 転位-結晶塑性シミュレーション”, 第 55 回材料工学連合講演会, (日本学術会議, 京都, 2011), pp.23-24.
- (2) 田尻聡太郎\*, 上田亮, 只野裕一, 志澤一之, “GN 転位-結晶塑性 FEM 解析による Mg 基 LPSO 相におけるキンクバンド形成機構の検討”, 第 25 回計算力学講演会, (日本機械学会, 兵庫, 2012),

No.12-4, pp.355-357.

- (3) 志澤一之\*, 上田亮, “Mg 基 LPSO 相におけるキंकバンド形成機構に関する転位-結晶塑性 FEM 解析”, 2013 年度春期講演大会, (日本金属学会, 東京, 2013), S6・4.
- (4) 上田亮\*, 田尻聡太郎, 只野裕一, 志澤一之, “LPSO 型 Mg 多結晶合金のキंक変形に関する転位-結晶塑性 FEM 解析”, M&M2013 材料力学カンファレンス, (日本機械学会, 岐阜, 2013), No.13-8, OS0418.
- (5) 小紫知慧\*, 上田亮, 志澤一之, “Mg 基 LPSO 相における底面転位易動度がキंक形成に及ぼす影響に関する転位-結晶塑性 FEM 解析”, 第 26 回計算力学講演会, (日本機械学会, 佐賀, 2013), No.13-3, 1418 (2 pages).
- (6) 上田亮\*, 志澤一之, “LPSO 型 Mg 多結晶合金中のキंक形成・進展に関する転位-結晶塑性 FEM 解析”, M&M2014 材料力学カンファレンス, (日本機械学会, 福島, 2014), No.14-3, OS0103.
- (7) 池田恵子\*, 上田亮, 志澤一之, “Mg 基 LPSO 相単結晶における変形の初期方位依存性に関する転位-結晶塑性 FEM 解析と実験結果との比較”, 第 27 回計算力学講演会, (日本機械学会, 岩手, 2014), No.14-14, 2002 (2 pages).
- (8) 上田亮\*, 志澤一之, “転位-結晶塑性 FEM 解析に基づく Mg 基 LPSO 相中のキंक帯形成およびそのメッシュ依存性に関する検討”, 平成 27 年度塑性加工春季講演会, (日本塑性加工学会, 横浜, 2015), pp.265-266.
- (9) 木村祐一\*, 鯨井翔, 上田亮, 志澤一之, “Multi-phase-field モデルおよび転位-結晶塑性モデルに基づく LPSO 型 Mg 二相合金の  $\alpha$ -Mg 相に対する動的再結晶シミュレーション”, 第 28 回計算力学講演会, (日本機械学会, 横浜, 2015), No.15-19, 026 (2 pages).
- (10) 宇塚友亮\*, 上田亮, 志澤一之, “CRSS の寸法依存性を考慮した Mg 基 LPSO 単結晶のマイクロピラーに対する転位-結晶塑性 FEM 解析”, M&M2015 材料力学カンファレンス, (日本機械学会, 横浜, 2015), No.15-6, OS0121-236.

#### 6. その他

- (1) 受賞 日本材料学会 平成 23 年度 塑性工学部門委員会優秀学生講演発表賞.
- (2) 受賞 日本塑性加工学会 平成 27 年度 塑性加工春季講演会優秀論文講演奨励賞.

## 補足 A

# 2章の補足

### A.1 ベクトルおよびテンソルの共回転速度

本研究で採用する4配置構成では、第2中間配置 $\beta_{(m)}$ から現配置 $\beta_{(c)}$ への任意のベクトル $\underline{a}$ および2階のテンソル $\underline{A}$ の配置変換は次式で与えられる。

$$\underline{a}_{(m)} = \mathbf{R}^{*\mathbf{T}} \underline{a} \dots\dots\dots (\text{A.1})$$

$$\underline{A}_{(m)} = \mathbf{R}^{*\mathbf{T}} \underline{A} \mathbf{R}^* \dots\dots\dots (\text{A.2})$$

まず、式(A.1)について両辺の物質時間微分をとれば

$$\dot{\underline{a}}_{(m)} = (\mathbf{R}^{*\mathbf{T}} \underline{a})^\circ = \mathbf{R}^{*\mathbf{T}} \dot{\underline{a}} + \dot{\mathbf{R}}^{*\mathbf{T}} \underline{a} = \mathbf{R}^{*\mathbf{T}} (\dot{\underline{a}} + \mathbf{R}^* \dot{\mathbf{R}}^{*\mathbf{T}} \underline{a}) \dots\dots\dots (\text{A.3})$$

となる。ここで、 $\mathbf{R}^*$ は直交テンソルであるため $\mathbf{R}^* \mathbf{R}^{*\mathbf{T}} = \mathbf{I}$ となり、その物質時間微分をとれば次の関係が得られる。

$$(\mathbf{R}^* \mathbf{R}^{*\mathbf{T}})^\circ = \dot{\mathbf{I}} = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*\mathbf{T}} = -\mathbf{R}^* \dot{\mathbf{R}}^{*\mathbf{T}} \dots\dots\dots (\text{A.4})$$

したがって、式(2.10)より下部構造スピン $\mathbf{W}^*$ は次のように書ける。

$$\mathbf{W}^* = \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*\mathbf{T}} = -\mathbf{R}^* \dot{\mathbf{R}}^{*\mathbf{T}} \dots\dots\dots (\text{A.5})$$

式(A.5)を式(A.3)に代入すれば

$$\dot{\underline{a}}_{(m)} = \mathbf{R}^{*\mathbf{T}} (\dot{\underline{a}} - \mathbf{W}^* \underline{a}) = \mathbf{R}^{*\mathbf{T}} \overset{\vee}{\underline{a}} \dots\dots\dots (\text{A.6})$$

となり、式(2.16)が導かれる。

次に、式(A.2)の両辺の物質時間微分をとったのち、式(A.5)を適用すれば次式を得る。

$$\begin{aligned} \dot{\underline{A}}_{(m)} &= (\mathbf{R}^{*\mathbf{T}} \underline{A} \mathbf{R}^*)^\circ = \dot{\mathbf{R}}^{*\mathbf{T}} \underline{A} \mathbf{R}^* + \mathbf{R}^{*\mathbf{T}} \dot{\underline{A}} \mathbf{R}^* + \mathbf{R}^{*\mathbf{T}} \underline{A} \dot{\mathbf{R}}^* = \mathbf{R}^{*\mathbf{T}} (\dot{\underline{A}} + \mathbf{R}^* \dot{\mathbf{R}}^{*\mathbf{T}} \underline{A} + \underline{A} \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*\mathbf{T}}) \mathbf{R}^* \\ &= \mathbf{R}^{*\mathbf{T}} (\dot{\underline{A}} - \mathbf{W}^* \underline{A} + \underline{A} \mathbf{W}^*) \mathbf{R}^* = \mathbf{R}^{*\mathbf{T}} \overset{\vee}{\underline{A}} \mathbf{R}^* \dots\dots\dots (\text{A.7}) \end{aligned}$$

上式より式(2.17)が導かれる。

## A.2 各配置におけるひずみの定義

ひずみを Lagrange 的に表示する場合，弾性ひずみの参照配置は第 1 中間配置  $\beta_{(M)}$  であるため，式 (2.20)～式 (2.22) を用いて式 (2.23) 右辺第 1 項は次式のように書き直せる．

$$\begin{aligned} d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - d\mathbf{x}_{(M)} \cdot d\mathbf{x}_{(M)} &= \mathbf{F}d\mathbf{x}_{(l)} \cdot \mathbf{F}d\mathbf{x}_{(l)} - \mathbf{F}^p d\mathbf{x}_{(l)} \cdot \mathbf{F}^p d\mathbf{x}_{(l)} = (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{F}^{pT} \mathbf{F}^p) \cdot d\mathbf{x}_{(l)} \otimes d\mathbf{x}_{(l)} \\ &= 2\mathbf{E}_{(l)}^e \cdot d\mathbf{x}_{(l)} \otimes d\mathbf{x}_{(l)} \dots \dots \dots (A.8) \end{aligned}$$

同様に

$$\begin{aligned} d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - d\mathbf{x}_{(M)} \cdot d\mathbf{x}_{(M)} &= \mathbf{R}^* d\mathbf{x}_{(m)} \cdot \mathbf{R}^* d\mathbf{x}_{(m)} - \hat{\mathbf{U}}^{e-1} d\mathbf{x}_{(m)} \cdot \hat{\mathbf{U}}^{e-1} d\mathbf{x}_{(m)} = (\mathbf{I} - \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \hat{\mathbf{U}}^{e-1}) \cdot d\mathbf{x}_{(m)} \otimes d\mathbf{x}_{(m)} \\ &= 2\mathbf{E}_{(m)}^e \cdot d\mathbf{x}_{(m)} \otimes d\mathbf{x}_{(m)} \dots \dots \dots (A.9) \end{aligned}$$

および

$$\begin{aligned} d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - d\mathbf{x}_{(M)} \cdot d\mathbf{x}_{(M)} &= d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - \mathbf{F}^{*-1} d\mathbf{x} \cdot \mathbf{F}^{*-1} d\mathbf{x} = (\mathbf{I} - \mathbf{F}^{*-T} \mathbf{F}^{*-1}) \cdot d\mathbf{x} \otimes d\mathbf{x} \\ &= 2\mathbf{E}^e \cdot d\mathbf{x} \otimes d\mathbf{x} \dots \dots \dots (A.10) \end{aligned}$$

と書ける．以上の式 (A.8)～(A.10) より各配置における弾性ひずみの定義式 (2.26) が導ける．

次に，塑性ひずみの参照配置は初期配置  $\beta_{(l)}$  となることを考慮すれば，式 (2.20)～式 (2.22) を用いて式 (2.23) 右辺第 2 項は次のように書き直せる．

$$\begin{aligned} d\mathbf{x}_{(M)} \cdot d\mathbf{x}_{(M)} - d\mathbf{x}_{(l)} \cdot d\mathbf{x}_{(l)} &= d\mathbf{x}_{(M)} \cdot d\mathbf{x}_{(M)} - \mathbf{F}^{p-1} d\mathbf{x}_{(M)} \cdot \mathbf{F}^{p-1} d\mathbf{x}_{(M)} = (\mathbf{I} - \mathbf{F}^{p-T} \mathbf{F}^{p-1}) \cdot d\mathbf{x}_{(M)} \otimes d\mathbf{x}_{(M)} \\ &= 2\mathbf{E}_{(M)}^p \cdot d\mathbf{x}_{(M)} \otimes d\mathbf{x}_{(M)} \dots \dots \dots (A.11) \end{aligned}$$

同様に

$$\begin{aligned} d\mathbf{x}_{(M)} \cdot d\mathbf{x}_{(M)} - d\mathbf{x}_{(l)} \cdot d\mathbf{x}_{(l)} &= \hat{\mathbf{U}}^{e-1} d\mathbf{x}_{(m)} \cdot \hat{\mathbf{U}}^{e-1} d\mathbf{x}_{(m)} - \bar{\mathbf{F}}^{-1} d\mathbf{x}_{(m)} \cdot \bar{\mathbf{F}}^{-1} d\mathbf{x}_{(m)} \\ &= (\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} - \bar{\mathbf{F}}^{-T} \bar{\mathbf{F}}^{-1}) \cdot d\mathbf{x}_{(m)} \otimes d\mathbf{x}_{(m)} = 2\mathbf{E}_{(m)}^p \cdot d\mathbf{x}_{(m)} \otimes d\mathbf{x}_{(m)} \dots \dots \dots (A.12) \end{aligned}$$

および

$$\begin{aligned} d\mathbf{x}_{(M)} \cdot d\mathbf{x}_{(M)} - d\mathbf{x}_{(l)} \cdot d\mathbf{x}_{(l)} &= \mathbf{F}^{*-1} d\mathbf{x} \cdot \mathbf{F}^{*-1} d\mathbf{x} - \mathbf{F}^{-1} d\mathbf{x} \cdot \mathbf{F}^{-1} d\mathbf{x} = (\mathbf{F}^{*-T} \mathbf{F}^{*-1} - \mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^{-1}) \cdot d\mathbf{x} \otimes d\mathbf{x} \\ &= 2\mathbf{E}^p \cdot d\mathbf{x} \otimes d\mathbf{x} \dots \dots \dots (A.13) \end{aligned}$$

と書ける．式 (A.11)～(A.13) より各配置における塑性ひずみの定義式 (2.27) が導ける．



### A.3 GN 転位テンソルの別表現

式(2.113) 右辺は次のように現配置  $\beta_{(c)}$  における量を用いて書くこともできる.

$$\tilde{\mathbf{b}}_{(M)} = - \oint_{\mathcal{C}_{(M)}} d\mathbf{x}_{(M)} = - \oint_{\mathcal{C}} \mathbf{F}^{*-1} d\mathbf{x} = - \oint_{\mathcal{S}} (\text{curl } \mathbf{F}^{*-1}) \mathbf{n} da \dots\dots\dots (\text{A.14})$$

ここで, 式(A.14)の第3等式への変換には Stokes の回転定理を用いている. また, 微小面積要素の配置変換則  $\mathbf{n} da = (\det \mathbf{F}^*) \mathbf{F}^{*-T} \mathbf{n}_{(M)} da_{(M)}$  を用いて式(A.14)を変形すれば次式を得る.

$$\tilde{\mathbf{b}}_{(M)} = - \oint_{\mathcal{S}} (\text{curl } \mathbf{F}^{*-1}) \mathbf{n} da = - \oint_{\mathcal{S}_{(M)}} J^e (\text{curl } \mathbf{F}^{*-1}) \mathbf{F}^{*-T} \mathbf{n}_{(M)} da_{(M)} \dots\dots\dots (\text{A.15})$$

ただし,  $\det \mathbf{F}^* = (\det \mathbf{R}^*) (\det \hat{\mathbf{U}}^e)$  において  $\det \mathbf{R}^* = 1$  であることに注意されたい. 式(A.15)と式(2.115)を比較すれば GN 転位テンソルの別表現が次のように得られる.

$$\alpha_{(M)} = -J^e (\text{curl } \mathbf{F}^{*-1}) \mathbf{F}^{*-T} \dots\dots\dots (\text{A.16})$$

### A.4 各配置における GN 転位テンソル

式(2.116)より, 第1中間配置  $\beta_{(M)}$  における GN 転位テンソル  $\alpha_{(M)}$  を再掲すると

$$\alpha_{(M)} = -(\text{Curl } \mathbf{F}^p) \mathbf{F}^{pT} \dots\dots\dots (\text{A.17})$$

である. また, 式(A.17)は次のように書くこともできる.

$$\begin{aligned} \alpha_{(M)} \Leftrightarrow \alpha_{(M)\alpha\beta} &= -e_{KIJ} F_{\alpha J, I}^p F_{\beta K}^p = -e_{KIJ} F_{\alpha J, \gamma}^p F_{\gamma I}^p F_{\beta K}^p = -J^p e_{\beta\gamma\delta} F_{J\delta}^{p-1} F_{\alpha J, \gamma}^p \\ &= -e_{\beta\gamma\delta} (F_{J\delta}^{p-1} F_{\alpha J}^p)_{, \gamma} + e_{\beta\gamma\delta} F_{J\delta, \gamma}^{p-1} F_{\alpha J}^p = -e_{\beta\gamma\delta} \delta_{\alpha\delta, \gamma} + e_{\beta\gamma\delta} F_{J\delta, \gamma}^{p-1} F_{\alpha J}^p = e_{\beta\gamma\delta} F_{J\delta, \gamma}^{p-1} F_{\alpha J}^p \\ &\Leftrightarrow \mathbf{F}^p (\text{curl}_{(M)} \mathbf{F}^{p-1}) \dots\dots\dots (\text{A.18}) \end{aligned}$$

ここで,  $\text{curl}_{(M)}(\bullet)$  は第1中間配置における回転を表す. また, 式(A.18)の式変換では  $J^p = 1$  の関係を用いている. また, GN 転位テンソルは一般に反変テンソルとして表され, その配置変換則は次のように書ける.

$$\alpha = J^{*-1} \mathbf{R}^* \alpha_{(M)} \mathbf{R}^{*T} = J^{*-1} J^{e-1} \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \alpha_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{eT} \mathbf{R}^{*T} = J^{*-1} J^{e-1} \mathbf{F}^* \alpha_{(M)} \mathbf{F}^{*T} \dots\dots\dots (\text{A.19})$$

ただし,  $J^* \equiv \det \mathbf{R}^* = 1$  であり, 式(A.19)は式(2.117)と同じものである. なお, GN 転位テンソルは式(2.115)のように微小面積要素に対して定義されるため, 面積素の配置変換を考慮して式(A.19)には  $J^{*-1}$  および  $J^{e-1}$  を乗じている. したがって, 第2中間配置  $\beta_{(m)}$  における GN 転位テンソル  $\alpha_{(m)}$  は次のように書ける.

$$\alpha_{(m)} = J^{e-1} \hat{\mathbf{U}}^e \alpha_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{eT} = -J^{e-1} \hat{\mathbf{U}}^e (\text{Curl } \mathbf{F}^p) \mathbf{F}^{pT} \hat{\mathbf{U}}^{eT} = -J^{e-1} \hat{\mathbf{U}}^e (\text{Curl } \mathbf{F}^p) \bar{\mathbf{F}}^T \dots\dots\dots (\text{A.20})$$

あるいは式(A.18)を用いると

$$\alpha_{(m)} = J^{e-1} \hat{\mathbf{U}}^e \alpha_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{eT} = J^{e-1} \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^p (\text{curl}_{(M)} \mathbf{F}^{p-1}) \hat{\mathbf{U}}^{eT} = J^{e-1} \bar{\mathbf{F}} (\text{curl}_{(M)} \mathbf{F}^{p-1}) \hat{\mathbf{U}}^{eT} \dots\dots\dots (\text{A.21})$$

となる. さらに, 式 (A.20) は

$$\begin{aligned}
\alpha_{(m)} &\Leftrightarrow \alpha_{(m)\hat{\alpha}\hat{\beta}} = -J^{e-1} \hat{U}_{\hat{\alpha}\alpha}^e e_{KIJ} F_{\alpha J, I}^p \bar{F}_{\hat{\beta}K} = -J^{e-1} \hat{U}_{\hat{\alpha}\alpha}^e e_{KIJ} F_{\alpha J, \hat{\gamma}}^p \bar{F}_{\hat{\gamma}I} \bar{F}_{\hat{\beta}K} = -J^{e-1} \hat{U}_{\hat{\alpha}\alpha}^e (J^e J^p) e_{\hat{\beta}\hat{\gamma}\hat{\delta}} \bar{F}_{\hat{\delta}}^{-1} F_{\alpha J, \hat{\gamma}}^p \\
&= -\hat{U}_{\hat{\alpha}\alpha}^e e_{\hat{\beta}\hat{\gamma}\hat{\delta}} (\bar{F}_{\hat{\delta}}^{-1} F_{\alpha J}^p)_{, \hat{\gamma}} + \hat{U}_{\hat{\alpha}\alpha}^e e_{\hat{\beta}\hat{\gamma}\hat{\delta}} \bar{F}_{\hat{\delta}, \hat{\gamma}}^{-1} F_{\alpha J}^p = -\hat{U}_{\hat{\alpha}\alpha}^e e_{\hat{\beta}\hat{\gamma}\hat{\delta}} \hat{U}_{\hat{\alpha}\hat{\delta}, \hat{\gamma}}^{e-1} + \bar{F}_{\hat{\alpha}J} e_{\hat{\beta}\hat{\gamma}\hat{\delta}} \bar{F}_{\hat{\delta}, \hat{\gamma}}^{-1} \\
&\Leftrightarrow -\hat{U}^e (\text{curl}_{(m)} \hat{U}^{e-1}) + \bar{F} (\text{curl}_{(m)} \bar{F}^{-1}) \dots \dots \dots (A.22)
\end{aligned}$$

と書くこともできる. ただし,  $\text{curl}_{(m)}(\bullet)$  は第2中間配置における回転を表す. 以上の式 (A.20)~式 (A.22) をまとめると, 第2中間配置においてGN転位テンソルは

$$\alpha_{(m)} = -J^{e-1} \hat{U}^e (\text{Curl } F^p) \bar{F}^T = J^{e-1} \bar{F} (\text{curl}_{(m)} F^{p-1}) \hat{U}^{eT} = -\hat{U}^e (\text{curl}_{(m)} \hat{U}^{e-1}) + \bar{F} (\text{curl}_{(m)} \bar{F}^{-1}) \dots \dots (A.23)$$

と表される.

続いて, 式 (A.19) より現配置  $\beta_{(c)}$  におけるGN転位テンソルは次のように書ける.

$$\begin{aligned}
\alpha &= R^* \alpha_{(m)} R^{*T} = -J^{e-1} R^* \hat{U}^e (\text{Curl } F^p) F^{pT} \hat{U}^{eT} R^{*T} \\
&= -J^{e-1} F^* (\text{Curl } F^p) F^{pT} F^{*T} = -J^{e-1} F^* (\text{Curl } F^p) F^T \dots \dots \dots (A.24)
\end{aligned}$$

あるいは式 (A.24) をさらに式変形して

$$\begin{aligned}
\alpha &\Leftrightarrow \alpha_{ij} = -J^{e-1} F_{i\alpha}^* e_{KIJ} F_{\alpha J, I}^p F_{jK} = -J^{e-1} F_{i\alpha}^* e_{KIJ} F_{\alpha J, k}^p F_{kl} F_{jK} = -J^{e-1} F_{i\alpha}^* J e_{jkl} F_{\alpha J, k}^p F_{Jl}^{-1} \\
&= -J^p F_{i\alpha}^* e_{jkl} (F_{\alpha J}^p F_{Jl}^{-1})_{, k} + J^p F_{i\alpha}^* e_{jkl} F_{\alpha J}^p F_{Jl, k}^{-1} = -F_{i\alpha}^* e_{jkl} F_{\alpha l, k}^{*-1} + F_{iJ} e_{jkl} F_{Jl, k}^{-1} \\
&\Leftrightarrow -F^* (\text{curl } F^{*-1}) + F (\text{curl } F^{-1}) \dots \dots \dots (A.25)
\end{aligned}$$

と書くこともできる. 式 (A.24) および式 (A.25) より, 現配置におけるGN転位テンソルは

$$\alpha = -J^{e-1} F^* (\text{Curl } F^p) F^T = -F^* (\text{curl } F^{*-1}) + F (\text{curl } F^{-1}) \dots \dots \dots (A.26)$$

と表される.

## A.5 GN 転位テンソルの物質時間微分

式 (2.116) の両辺の物質時間微分をとると

$$\dot{\alpha}_{(m)} = -\left[ (\text{Curl } F^p) F^{pT} \right]^{\bullet} = -(\text{Curl } \dot{F}^p) F^{pT} - (\text{Curl } F^p) \dot{F}^{pT} \dots \dots \dots (A.27)$$

となる. 上式に式 (2.99) を適用すれば

$$\begin{aligned}
\dot{\alpha}_{(m)} &= -\left[ \text{Curl} \left( L_{(M)}^p F^p \right) \right] F^{pT} - (\text{Curl } F^p) F^{pT} L_{(M)}^{pT} \\
&= -\left[ \text{Curl} \left( L_{(M)}^p F^p \right) \right] F^{pT} + \alpha_{(M)} L_{(M)}^{pT} \dots \dots \dots (A.28)
\end{aligned}$$

ここで, 式 (A.28) 1行目から2行目への変形にはGN転位テンソルの定義式 (2.116) を用いている. 式 (A.28) 右辺第1項を指標表示にて式変形すると

$$-\left\{ \left[ \text{Curl} \left( L_{(M)}^p F^p \right) \right] F^{pT} \right\}_{\alpha\beta} = -e_{KIJ} \left( L_{(M)\alpha\gamma}^p F_{\gamma J}^p \right)_{, I} F_{\beta K}^p$$

$$\begin{aligned}
&= -e_{KIJ}L_{(M)\alpha\gamma,\delta}^p F_{\delta I}^p F_{\gamma J}^p F_{\beta K}^p - e_{KIJ}L_{(M)\alpha\gamma}^p F_{\gamma J,I}^p F_{\beta K}^p \\
&= -J^p e_{\beta\delta\gamma}L_{(M)\alpha\gamma,\delta}^p - e_{KIJ}L_{(M)\alpha\gamma}^p F_{\gamma J,I}^p F_{\beta K}^p \\
&= -e_{\beta\delta\gamma}L_{(M)\alpha\gamma,\delta}^p + L_{(M)\alpha\gamma}^p \alpha_{\gamma\beta} \dots \dots \dots (A.29)
\end{aligned}$$

と書ける. したがって, 式 (A.28) および式 (A.29) より次式を得る.

$$\dot{\alpha}_{(M)} = L_{(M)}^p \alpha_{(M)} + \alpha_{(M)} L_{(M)}^{pT} - \text{curl}_{(M)} L_{(M)}^p \dots \dots \dots (A.30)$$

また, 式 (A.30) 右辺第 1 項および第 2 項を左辺に移項すれば

$$\dot{\alpha}_{(M)} - L_{(M)}^p \alpha_{(M)} - \alpha_{(M)} L_{(M)}^{pT} = -\text{curl}_{(M)} L_{(M)}^p \dots \dots \dots (A.31)$$

と書ける. ここで, 任意の 2 階のテンソル  $\underline{A}$  に対して

$$\overset{\circ}{\underline{A}} \equiv \dot{\underline{A}} - \underline{L}\underline{A} - \underline{A}\underline{L}^T \dots \dots \dots (A.32)$$

と定義される速度は Oldroyd 速度または upper-convected 導関数<sup>(80)</sup> と呼ばれる客観性を有する速度であり, 式 (A.31) は移流速度を  $L_{(M)}^p$  とした  $\alpha_{(M)}$  の Oldroyd 速度とみなすことができる. すなわち,

$$\overset{\circ}{\alpha}_{(M)} \equiv \dot{\alpha}_{(M)} - L_{(M)}^p \alpha_{(M)} - \alpha_{(M)} L_{(M)}^{pT} = -\text{curl}_{(M)} L_{(M)}^p \dots \dots \dots (A.33)$$

である.

## A.6 各配置における GN 転位ドリフト速度

第 1 中間配置  $\beta_{(M)}$  における GN 転位ドリフト速度  $\mathbf{Z}_{(M)}$  は式 (2.123) および式 (2.133) より

$$\mathbf{Z}_{(M)} = \overset{\circ}{\alpha}_{(M)} = \dot{\alpha}_{(M)} - L_{(M)}^p \alpha_{(M)} - \alpha_{(M)} L_{(M)}^{pT} \dots \dots \dots (A.34)$$

である. ここで, 上式最右辺第 1 項は式 (A.19) より

$$\begin{aligned}
\dot{\alpha}_{(M)} &= \left( J^e \mathbf{F}^{*-1} \alpha \mathbf{F}^{*-T} \right)^\circ \\
&= \dot{J}^e \mathbf{F}^{*-1} \alpha \mathbf{F}^{*-T} + J^e \dot{\mathbf{F}}^{*-1} \alpha \mathbf{F}^{*-T} + J^e \mathbf{F}^{*-1} \dot{\alpha} \mathbf{F}^{*-T} + J^e \mathbf{F}^{*-1} \alpha \dot{\mathbf{F}}^{*-T} \\
&= J^e \mathbf{F}^{*-1} \left[ \dot{\alpha} - L^e \alpha - \alpha L^{eT} + (\text{tr } L) \alpha \right] \mathbf{F}^{*-T} \dots \dots \dots (A.35)
\end{aligned}$$

と書ける. ただし, 式 (2.13) より  $\dot{J}^e = \dot{J} = J \text{tr } L = J^e \text{tr } L$  であり, 式 (2.41) を用いて  $L^e = \dot{\mathbf{F}}^* \mathbf{F}^{*-1} = -\mathbf{F}^* \dot{\mathbf{F}}^{*-1}$  より  $\dot{\mathbf{F}}^{*-1} = -\mathbf{F}^{*-1} L^e$  である. また, 式 (A.34) 最右辺第 2 項および第 3 項は, 式 (2.44)<sub>2</sub> および式 (A.19) よりそれぞれ次式のように変形できる.

$$L_{(M)}^p \alpha_{(M)} = \left( \mathbf{F}^{*-1} L^p \mathbf{F}^* \right) \left( J^e \mathbf{F}^{*-1} \alpha \mathbf{F}^{*-T} \right) = J^e \mathbf{F}^{*-1} L^p \alpha \mathbf{F}^{*-T} \dots \dots \dots (A.36)$$

$$\alpha_{(M)} L_{(M)}^{pT} = \left( J^e \mathbf{F}^{*-1} \alpha \mathbf{F}^{*-T} \right) \left( \mathbf{F}^{*-1} L^p \mathbf{F}^* \right)^T = J^e \mathbf{F}^{*-1} \alpha L^{pT} \mathbf{F}^{*-T} \dots \dots \dots (A.37)$$

したがって、式 (A.35)～式 (A.37) より式 (A.34) は

$$\begin{aligned}\mathbf{Z}_{(M)} &= J^e \mathbf{F}^{*-1} \left[ \dot{\hat{\alpha}} - L^e \alpha - \alpha L^{eT} + (\text{tr } L) \alpha - L^p \alpha - \alpha L^{pT} \right] \mathbf{F}^{*-T} \\ &= J^e \mathbf{F}^{*-1} \left[ \dot{\hat{\alpha}} - L \alpha - \alpha L^T + (\text{tr } L) \alpha \right] \mathbf{F}^{*-T} = J^e \mathbf{F}^{*-1} \overset{\circ}{\alpha} \mathbf{F}^{*-T} \dots\dots\dots (A.38)\end{aligned}$$

と書ける．ここで、

$$\overset{\circ}{\alpha} = \dot{\hat{\alpha}} - L \alpha - \alpha L^T + (\text{tr } L) \alpha \dots\dots\dots (A.39)$$

は現配置における GN 転位テンソルの Truesdell 速度<sup>(103)</sup>である．すなわち、現配置における GN 転位ドリフト速度を  $\mathbf{Z} \equiv \overset{\circ}{\alpha}$  と定義すれば、GN 転位ドリフト速度の配置変換則が  $\alpha$  に対する式 (A.19) と同形式で次式のように与えられる．

$$\mathbf{Z} = J^{e-1} \mathbf{F}^* \mathbf{Z}_{(M)} \mathbf{F}^{*T} \dots\dots\dots (A.40)$$

また、第 1 中間配置において結晶基底は一様と仮定すれば GN 転位ドリフト速度は式 (2.132) のように書ける．そこで、式 (2.132) に結晶基底の変換則式 (2.102) および式 (2.130) を適用すれば次式を得る．

$$\begin{aligned}\mathbf{Z}_{(M)} &= \sum_{\alpha} \left[ \tilde{b}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} (\mathbf{F}^{*-1} \mathbf{s}^{(\alpha)}) \otimes (\mathbf{F}^{*-1} \mathbf{s}^{(\alpha)}) + \tilde{b}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} (\mathbf{F}^{*-1} \mathbf{s}^{(\alpha)}) \otimes (\mathbf{F}^{*-1} \mathbf{t}^{(\alpha)}) \right] \\ &= J^e \mathbf{F}^{*-1} \left[ \sum_{\alpha} \left( J^{e-1} \tilde{b}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)} + J^{e-1} \tilde{b}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}^{(\alpha)} \right) \right] \mathbf{F}^{*-T} \dots\dots\dots (A.41)\end{aligned}$$

したがって、上式を式 (A.40) と比較すれば  $\mathbf{Z}$  は

$$\mathbf{Z} = \sum_{\alpha} \left( J^{e-1} \tilde{b}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)} + J^{e-1} \tilde{b}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}^{(\alpha)} \right) \dots\dots\dots (A.42)$$

と書ける．

また、式 (A.34) 最右辺第 1 項は式 (A.19) を用いて次のようにも書ける．

$$\begin{aligned}\dot{\hat{\alpha}}_{(M)} &= \left( J^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \alpha_{(m)} \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \right)^{\circ} \\ &= \dot{J}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \alpha_{(m)} \hat{\mathbf{U}}^{e-T} + J^e \dot{\hat{\mathbf{U}}}^{e-1} \alpha_{(m)} \hat{\mathbf{U}}^{e-T} + J^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \dot{\alpha}_{(m)} \hat{\mathbf{U}}^{e-T} + J^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \alpha_{(m)} \dot{\hat{\mathbf{U}}}^{e-T} \\ &= J^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \left[ \dot{\hat{\alpha}}_{(m)} - \mathbf{D}_{(m)}^e \alpha_{(m)} - \alpha_{(m)} \mathbf{D}_{(m)}^{eT} + (\text{tr } L) \alpha_{(m)} \right] \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \\ &= J^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \left[ \dot{\hat{\alpha}}_{(m)} - L_{(m)}^e \alpha_{(m)} - \alpha_{(m)} L_{(m)}^{eT} + (\text{tr } L) \alpha_{(m)} \right] \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \dots\dots\dots (A.43)\end{aligned}$$

ただし、式 (2.56) より  $\mathbf{D}_{(m)}^e = \dot{\hat{\mathbf{U}}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} = -\hat{\mathbf{U}}^e \dot{\hat{\mathbf{U}}}^{e-1}$  と書けるため、 $\dot{\hat{\mathbf{U}}}^{e-1} = -\hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{D}_{(m)}^e$  となる．また、式 (A.34) 最右辺第 2 項および第 3 項はそれぞれ次式のように変形できる．

$$L_{(M)}^p \alpha_{(M)} = \left( \hat{\mathbf{U}}^{e-1} L_{(m)}^p \hat{\mathbf{U}}^e \right) \left( J^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \alpha_{(m)} \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \right) = J^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} L_{(m)}^p \alpha_{(m)} \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \dots\dots\dots (A.44)$$

$$\alpha_{(M)} L_{(M)}^{pT} = \left( J^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \alpha_{(m)} \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \right) \left( \hat{\mathbf{U}}^{e-1} L_{(m)}^p \hat{\mathbf{U}}^e \right)^T = J^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \alpha_{(m)} L_{(m)}^{pT} \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \dots\dots\dots (A.45)$$

したがって、式 (A.43)~式 (A.45) より式 (A.34) は

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}_{(M)} &= J^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \left[ \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)} - \mathbf{L}_{(m)}^e \mathbf{s} \boldsymbol{\alpha}_{(m)} - \boldsymbol{\alpha}_{(m)} \mathbf{L}_{(m)}^{eT} \mathbf{s} + (\text{tr } \mathbf{L}) \boldsymbol{\alpha}_{(m)} - \mathbf{L}_{(m)}^p \boldsymbol{\alpha}_{(m)} - \boldsymbol{\alpha}_{(m)} \mathbf{L}_{(m)}^{pT} \right] \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \\ &= J^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \left[ \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)} - (\mathbf{L}_{(m)}^e \mathbf{s} + \mathbf{L}_{(m)}^p) \boldsymbol{\alpha}_{(m)} - \boldsymbol{\alpha}_{(m)} (\mathbf{L}_{(m)}^e \mathbf{s} + \mathbf{L}_{(m)}^p)^T + (\text{tr } \mathbf{L}) \boldsymbol{\alpha}_{(m)} \right] \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \\ &= J^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \left[ \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)} - \dot{\mathbf{L}}_{(m)} \boldsymbol{\alpha}_{(m)} - \boldsymbol{\alpha}_{(m)} \dot{\mathbf{L}}_{(m)}^T + (\text{tr } \mathbf{L}) \boldsymbol{\alpha}_{(m)} \right] \hat{\mathbf{U}}^{e-T} = J^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)} \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \dots \dots \dots (\text{A.46}) \end{aligned}$$

と書ける. ただし,

$$\dot{\mathbf{L}}_{(m)} \equiv \mathbf{L}_{(m)}^e \mathbf{s} + \mathbf{L}_{(m)}^p \dots \dots \dots (\text{A.47})$$

および

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)} \equiv \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)} - \dot{\mathbf{L}}_{(m)} \boldsymbol{\alpha}_{(m)} - \boldsymbol{\alpha}_{(m)} \dot{\mathbf{L}}_{(m)}^T + (\text{tr } \mathbf{L}) \boldsymbol{\alpha}_{(m)} \dots \dots \dots (\text{A.48})$$

と定義している. すなわち, 第2中間配置におけるGN転位ドリフト速度を  $\mathbf{Z}_{(m)} \equiv \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)}$  と定義すると第1中間配置から第2中間配置へのGN転位ドリフト速度の配置変換則が  $\boldsymbol{\alpha}$  に対する式 (A.19) と同形式で次式のように与えられる.

$$\mathbf{Z}_{(m)} = J^{e-1} \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{Z}_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{eT} \dots \dots \dots (\text{A.49})$$

また, 第1中間配置において結晶基底は一樣と仮定すれば結晶基底の変換則より次式を得る.

$$\mathbf{Z}_{(m)} = \sum_{\alpha} \left( J^{e-1} \tilde{b}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} + J^{e-1} \tilde{b}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (\text{A.50})$$

## A.7 SS転位密度の導出

Orowan の式を次式に示す<sup>(71)</sup>.

$$\gamma = \rho_m \tilde{b} \bar{x} \dots \dots \dots (\text{A.51})$$

ここで,  $\gamma$  はすべり,  $\rho_m$  は可動転位密度,  $\tilde{b}$  は Burgers ベクトルの大きさ,  $\bar{x}$  は図 A.1 に示す塑性変形に要した転位の平均移動距離である. なお, 表記の簡単化のためにすべり系の量を表す上付き添字 ( $\alpha$ ) は省略している. また, 簡単のために刃状転位についてのみ考えることとし, 図 A.1 に示すように  $n$  本の転位が平均して距離  $\bar{x}$  だけ運動したとすれば, すべりは次式で表される.

$$\gamma = \frac{n \tilde{b} \bar{x}}{H \bar{W}} = \frac{n \tilde{b} D \bar{x}}{V} \dots \dots \dots (\text{A.52})$$

ただし,  $V$  は考慮する結晶の体積  $V = HWD$  である. なお, 式 (A.52) はらせん転位を考えた場合にも成立する. 式 (A.52) 最右辺における  $nD\bar{x}$  はすべり面上で転位が掃いた総面積であり, この面積を  $A$  とすれば式 (A.52) は次のように書き換えられる.

$$\gamma = \frac{\tilde{b} A}{V} \dots \dots \dots (\text{A.53})$$

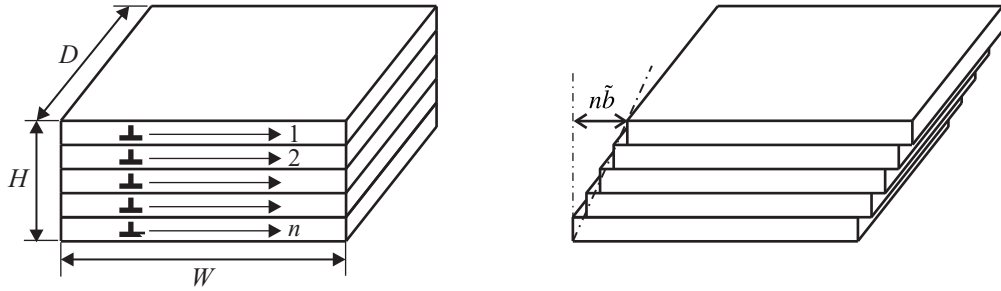


Fig. A.1 Plastic deformation by dislocation glide.

ここで、図 2.10 のように矩形近似した転位ループを考えると、式 (A.53) のすべり増分  $d\gamma$  は次式のように与えられる。

$$d\gamma = \frac{\tilde{b}}{V} dA = \frac{\tilde{b}}{V} (d \cdot \kappa d \cdot dN) = \tilde{b} \kappa d^2 \cdot dn \dots \dots \dots (A.54)$$

ただし、 $d$  はらせん転位の長さ、 $\kappa$  は転位ループの辺長比であり、 $dN$  は増分間における転位ループの増加個数、 $dn$  は単位体積あたりの転位ループの増加個数  $dn \equiv dN/V$  (次元は [個/ $m^3$ ]) である。

転位密度は単位体積あたりの転位線の長さとして定義されるため、図 2.10 に基づいて可動転位密度増分  $d\rho_m$  をらせん転位成分および刃状転位成分にそれぞれ分けて考える。すなわち、図 2.10 より、らせん転位密度増分  $d\rho_{m(s)}$  および刃状転位密度増分  $d\rho_{m(e)}$  はそれぞれ次式で与えられる。

$$d\rho_{m(s)} = \frac{2d}{V} dN = 2d \cdot dn \dots \dots \dots (A.55)$$

$$d\rho_{m(e)} = \frac{2\kappa d}{V} dN = 2\kappa d \cdot dn \dots \dots \dots (A.56)$$

ここで、式 (A.54) より  $dn = d\gamma/(\tilde{b}\kappa d^2)$  であるため、式 (A.55) および式 (A.56) はそれぞれ

$$d\rho_{m(s)} = \frac{2}{\tilde{b}\kappa d} d\gamma \dots \dots \dots (A.57)$$

$$d\rho_{m(e)} = \frac{2}{\tilde{b}d} d\gamma \dots \dots \dots (A.58)$$

となる。したがって、全可動転位密度増分はらせん成分と刃状成分の和をとることで

$$d\rho_m = d\rho_{m(s)} + d\rho_{m(e)} = \frac{2}{\tilde{b}d} \frac{1+\kappa}{\kappa} d\gamma \dots \dots \dots (A.59)$$

と書ける。また、転位の平均飛行距離  $L$  は図 2.10 よりらせん転位および刃状転位の運動距離の平均をとることで次式のように表される。

$$L = \frac{1}{2} \left( \frac{d}{2} + \frac{\kappa d}{2} \right) = \frac{(1+\kappa)d}{4} \dots \dots \dots (A.60)$$

したがって、 $d = 4L/(1+\kappa)$  となり、これを式 (A.59) に代入すると次式を得る。

$$d\rho_m = \frac{(1+\kappa)^2}{2\kappa} \frac{1}{\tilde{b}L} d\gamma \dots \dots \dots (A.61)$$

いま考えている時間増分幅を  $\Delta t$  とし、時刻  $t = 0$  で転位源から発生した転位は時刻  $t = \Delta t$  で全て不動化すると考える。この場合には、対象とする増分間において可動転位密度増分  $d\rho_m$  は蓄積転位密度増分  $d\rho_{im}$  に等しくなるはずである。すなわち、式 (A.61) より

$$d\rho_{im} = \frac{(1+\kappa)^2}{2\kappa} \frac{1}{\tilde{b}L} dy \dots\dots\dots (A.62)$$

と書くことができる。したがって、蓄積転位密度の速度は次式で与えられる。

$$\dot{\rho}_{im} = \frac{(1+\kappa)^2}{2\kappa} \frac{1}{\tilde{b}L} \dot{\gamma} \dots\dots\dots (A.63)$$

本研究では、一度拡張した転位ループの収縮および転位の対消滅等の回復現象は考えない。したがって、式 (A.63) は次のように書き直せる。

$$\dot{\rho}_{im} = \frac{(1+\kappa)^2}{2\kappa} \frac{1}{\tilde{b}L} |\dot{\gamma}| = \frac{c}{\tilde{b}L} |\dot{\gamma}| \dots\dots\dots (A.64)$$

ただし、 $c \equiv (1+\kappa)^2/(2\kappa)$  は数値係数である。式 (A.64) で表される蓄積転位密度は単位体積あたりの転位ループ周長を表しており、すなわち転位対密度を与える。したがって、式 (A.64) が SS 転位密度の定義式となる。

$$\dot{\rho}_s \equiv \frac{c}{\tilde{b}L} |\dot{\gamma}| \dots\dots\dots (A.65)$$

なお、以上の導出では図 2.10 における  $d$  および  $\kappa$  を定数としており、もし転位ループの形状を完全な正方形に近似した場合には  $\kappa = 1$  より  $c = 2$  となる。LPSO 相における転位ループの形状に関する実験報告はないため、本研究では簡単のために転位ループを正方形近似する。



## 補足B

# 4章の補足

### B.1 異方性弾性係数

異方性弾性係数は、式(4.4)および式(4.9)に示されるように、その対称性から独立な成分は21成分に制限される。そこで、添字2つの Voigt 表記により  $C^e$  を行列表示すると

$$[C^e] = \begin{bmatrix} C_{11}^e & C_{12}^e & C_{13}^e & C_{14}^e & C_{15}^e & C_{16}^e \\ & C_{22}^e & C_{23}^e & C_{24}^e & C_{25}^e & C_{26}^e \\ & & C_{33}^e & C_{34}^e & C_{35}^e & C_{36}^e \\ & & & C_{44}^e & C_{45}^e & C_{46}^e \\ & \text{Sym.} & & & C_{55}^e & C_{56}^e \\ & & & & & C_{66}^e \end{bmatrix} \dots\dots\dots (B.1)$$

となり、六方晶金属の場合には5つの独立な成分により次のように表される<sup>(108)</sup>。

$$[C^e] = \begin{bmatrix} C_{11}^e & C_{12}^e & C_{13}^e & 0 & 0 & 0 \\ & C_{11}^e & C_{13}^e & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{33}^e & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44}^e & 0 & 0 \\ & \text{Sym.} & & & C_{44}^e & 0 \\ & & & & & \frac{C_{11}^e - C_{12}^e}{2} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (B.2)$$

ここで、 $C_{11}^e$ ,  $C_{12}^e$ ,  $C_{13}^e$ ,  $C_{33}^e$  および  $C_{44}^e$  は材料固有の物性値である。なお、空間に固定した xyz 正規直交座標系における成分表記と Voigt 表記の対応は表 B.1 を参照されたい。ただし、ここでは HCP の c 軸を z 軸に一致させている。

TableB.1 Relationship between Cartesian components and Voigt notation.

Cartesian components	xx	yy	zz	yz, zy	zx, xz	xy, yx
Voigt notation	1	2	3	4	5	6

## B.2 高次応力の速度形構成式の導出

式(4.16)の両辺の物質時間微分をとれば

$$\dot{\xi}_{(m)}^{(\alpha)} = \lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left( \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \boldsymbol{t}_{(m)}^{(\alpha)} - \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \boldsymbol{s}_{(m)}^{(\alpha)} \right) + \lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left( \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \dot{\boldsymbol{t}}_{(m)}^{(\alpha)} - \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \dot{\boldsymbol{s}}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (\text{B.3})$$

となる。ただし、 $\lambda$ は定数としている。また、式(3.21)の逆関係に物質時間微分を施すと次式を得る。

$$\dot{\xi}_{(m)}^{(\alpha)} = \left( \boldsymbol{R}^{*T} \xi^{(\alpha)} \right)^{\bullet} = \dot{\boldsymbol{R}}^{*T} \xi^{(\alpha)} + \boldsymbol{R}^{*T} \dot{\xi}^{(\alpha)} = \boldsymbol{R}^{*T} \overset{\vee}{\xi}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (\text{B.4})$$

ただし、式(2.16)の関係を用いている。同様に、式(2.102)および式(2.130)より第2中間配置 $\beta_{(m)}$ における結晶基底 $\boldsymbol{s}_{(m)}^{(\alpha)}$ および $\boldsymbol{t}_{(m)}^{(\alpha)}$ の物質時間微分がそれぞれ次のように得られる。

$$\dot{\boldsymbol{s}}_{(m)}^{(\alpha)} = \left( \boldsymbol{R}^{*T} \boldsymbol{s}^{(\alpha)} \right)^{\bullet} = \boldsymbol{R}^{*T} \left( \dot{\boldsymbol{s}}^{(\alpha)} - \boldsymbol{W}^* \boldsymbol{s}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (\text{B.5})$$

$$\dot{\boldsymbol{t}}_{(m)}^{(\alpha)} = \left( \boldsymbol{R}^{*T} \boldsymbol{t}^{(\alpha)} \right)^{\bullet} = \boldsymbol{R}^{*T} \left( \dot{\boldsymbol{t}}^{(\alpha)} - \boldsymbol{W}^* \boldsymbol{t}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (\text{B.6})$$

式(2.102)、式(2.130)および式(B.4)~式(B.6)を式(B.3)に代入し、両辺に前方(左側)から $\boldsymbol{R}^*$ を乗じて現配置にpush-forwardすれば次式が得られる。

$$\overset{\vee}{\xi}^{(\alpha)} = \lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left( \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \boldsymbol{t}^{(\alpha)} - \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \boldsymbol{s}^{(\alpha)} \right) + \lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left[ \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \left( \dot{\boldsymbol{t}}^{(\alpha)} - \boldsymbol{W}^* \boldsymbol{t}^{(\alpha)} \right) - \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \left( \dot{\boldsymbol{s}}^{(\alpha)} - \boldsymbol{W}^* \boldsymbol{s}^{(\alpha)} \right) \right] \dots \dots \dots (\text{B.7})$$

さらに、結晶基底 $\boldsymbol{s}^{(\alpha)}$ および $\boldsymbol{t}^{(\alpha)}$ の発展がそれぞれ

$$\dot{\boldsymbol{s}}^{(\alpha)} = \boldsymbol{W}^* \boldsymbol{s}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (\text{B.8})$$

$$\dot{\boldsymbol{t}}^{(\alpha)} = \boldsymbol{W}^* \boldsymbol{t}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (\text{B.9})$$

のように表される<sup>(109)(110)</sup>と考えれば、式(B.7)は

$$\overset{\vee}{\xi}^{(\alpha)} = \lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left( \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \boldsymbol{t}^{(\alpha)} - \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \boldsymbol{s}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (\text{B.10})$$

と書ける。

## B.3 転位論に基づく背応力の導出

図B.1に示す局所座標系(結晶座標系)のもとで、 $x_3$ 軸に沿った無限に長い一本の転位線近傍の応力場は転位論<sup>(87)(71)</sup>によると次のように表される。

$$\text{For screw dislocation : } \left[ \boldsymbol{\sigma}_{d(s)}^{(\alpha)} \right] = \frac{\mu \tilde{b}^{(\alpha)}}{2\pi} \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2} \\ 0 & 0 & \frac{x_1}{x_1^2 + x_2^2} \\ -\frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2} & \frac{x_1}{x_1^2 + x_2^2} & 0 \end{bmatrix} \dots \dots \dots (\text{B.11})$$

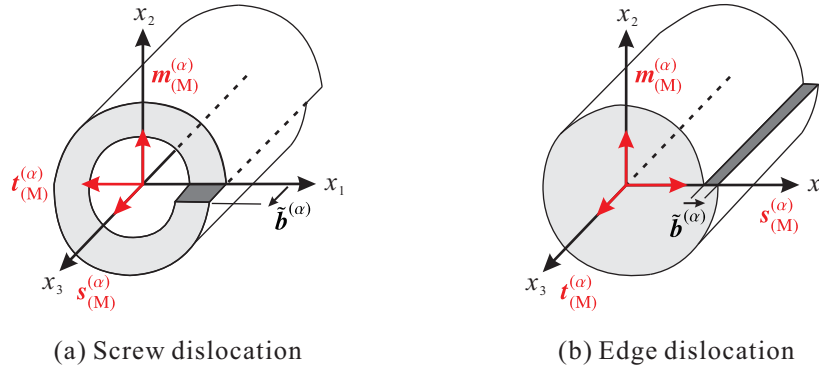


Fig. B.1 Volterra dislocations.

$$\text{For edge dislocation : } \left[ \sigma_{d(e)}^{(\alpha)} \right] = \frac{\mu \tilde{b}^{(\alpha)}}{2\pi(1-\nu)} \begin{bmatrix} -\frac{x_2(3x_1^2+x_2^2)}{(x_1^2+x_2^2)^2} & \frac{x_1(x_1^2-x_2^2)}{(x_1^2+x_2^2)^2} & 0 \\ \frac{x_1(x_1^2-x_2^2)}{(x_1^2+x_2^2)^2} & \frac{x_2(x_1^2-x_2^2)}{(x_1^2+x_2^2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2\nu x_2}{x_1^2+x_2^2} \end{bmatrix} \dots\dots(B.12)$$

ここで、 $\mu$  および  $\nu$  はそれぞれ等方弾性体における横弾性係数およびポアソン比である．式 (B.11) および式 (B.12) は原点に位置する転位が座標  $(x_1, x_2)$  にもたらす応力を表している．一方で、座標  $(x_1, x_2)$  に位置する  $x_3$  軸に平行な転位線が原点位置にもたらす応力は、式 (B.11) および式 (B.12) における各成分の符号を逆転させたものとして表される．

次に、原点周囲に同一なすべり系かつ同符号の転位（ただし、 $x_3$  軸に平行な転位線）が多数存在する場合を考え、その密度の空間的变化を簡単のために原点まわりに線形近似する．すなわち、

$$\rho_G^{(\alpha)}(x_1, x_2) \cong \rho_G^{(\alpha)}|_0 + \frac{\partial \rho_G^{(\alpha)}}{\partial x_1} \Big|_0 x_1 + \frac{\partial \rho_G^{(\alpha)}}{\partial x_2} \Big|_0 x_2 \dots\dots(B.13)$$

と表す．ただし、 $(\bullet)|_0$  は原点における値を表しており、 $x_3$  軸に平行な無限長の転位線を考えているため  $x_1, x_2$  面内で議論している．また、式 (B.13) の近似は遠方に存在する同一すべり系の転位線も  $x_3$  軸に平行であると仮定するため、以降の議論は結晶格子が歪んでいない初期配置  $\beta_{(0)}$  にて行う．続いて、円柱座標系  $(x_1 = r \cos\theta, x_2 = r \sin\theta, x_3 = x_3)$  を導入すると式 (B.13) は次のように書き直せる．

$$\rho_G^{(\alpha)}(x_1, x_2) \cong \rho_G^{(\alpha)}|_0 + \left( \cos\theta \frac{\partial \rho_G^{(\alpha)}}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r} \frac{\partial \rho_G^{(\alpha)}}{\partial \theta} \right) \Big|_0 r \cos\theta + \left( \sin\theta \frac{\partial \rho_G^{(\alpha)}}{\partial r} + \frac{\cos\theta}{r} \frac{\partial \rho_G^{(\alpha)}}{\partial \theta} \right) \Big|_0 r \sin\theta \dots\dots(B.14)$$

また、原点から半径  $\bar{r}$  内に存在する転位が原点位置にもたらす応力は次式で与えられる．

$$\sigma_{IJ}^{(\alpha)} = \int_0^{\bar{r}} \int_0^{2\pi} \sigma_{dIJ}^{(\alpha)} \rho_G^{(\alpha)} r \, d\theta \, dr \dots\dots(B.15)$$

したがって、式 (B.14) および式 (B.15) より、例えば  $\sigma_{(s)13}^{(\alpha)}$  成分は式 (B.11) における  $\sigma_{d(s)13}^{(\alpha)}$  成分（ただし、原点位置に作用する応力を考えるため (-1) 倍する）を用いて

$$\begin{aligned}\sigma_{(s)13}^{(\alpha)} &= \int_0^{\bar{r}} \int_0^{2\pi} \sigma_{d(s)13}^{(\alpha)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} r \, d\theta dr \\ &\cong \int_0^{\bar{r}} \int_0^{2\pi} \frac{\mu \tilde{b}^{(\alpha)}}{2\pi} \frac{\sin\theta}{r} \left[ \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \Big|_0 + \left( \cos\theta \frac{\partial \rho_{G(s)}^{(\alpha)}}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r} \frac{\partial \rho_{G(s)}^{(\alpha)}}{\partial \theta} \right) \Big|_0 r \cos\theta \right. \\ &\quad \left. + \left( \sin\theta \frac{\partial \rho_{G(s)}^{(\alpha)}}{\partial r} + \frac{\cos\theta}{r} \frac{\partial \rho_{G(s)}^{(\alpha)}}{\partial \theta} \right) \Big|_0 r \sin\theta \right] r \, d\theta dr \\ &= \frac{\mu \tilde{b}^{(\alpha)} \bar{r}^2}{4} \frac{\partial \rho_{G(s)}^{(\alpha)}}{\partial x_2} \Big|_0 \dots\dots\dots (B.16)\end{aligned}$$

と表される．同様にらせん転位に起因する応力  $\sigma_{(s)}^{(\alpha)}$  および刃状転位に起因する応力  $\sigma_{(e)}^{(\alpha)}$  をそれぞれ計算すると  $x_1 x_2 x_3$  局所座標系において以下ようになる．

$$\text{For screw dislocation : } \left[ \sigma_{(s)}^{(\alpha)} \right] = \frac{\mu \tilde{b}^{(\alpha)} \bar{r}^2}{4} \begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{\partial \rho_{G(s)}^{(\alpha)}}{\partial x_2} \Big|_0 \\ 0 & 0 & -\frac{\partial \rho_{G(s)}^{(\alpha)}}{\partial x_1} \Big|_0 \\ \frac{\partial \rho_{G(s)}^{(\alpha)}}{\partial x_2} \Big|_0 & -\frac{\partial \rho_{G(s)}^{(\alpha)}}{\partial x_1} \Big|_0 & 0 \end{bmatrix} \dots\dots\dots (B.17)$$

$$\text{For edge dislocation : } \left[ \sigma_{(e)}^{(\alpha)} \right] = \frac{\mu \tilde{b}^{(\alpha)} \bar{r}^2}{8(1-\nu)} \begin{bmatrix} 3 \frac{\partial \rho_{G(e)}^{(\alpha)}}{\partial x_2} \Big|_0 & -\frac{\partial \rho_{G(e)}^{(\alpha)}}{\partial x_1} \Big|_0 & 0 \\ -\frac{\partial \rho_{G(e)}^{(\alpha)}}{\partial x_1} \Big|_0 & \frac{\partial \rho_{G(e)}^{(\alpha)}}{\partial x_2} \Big|_0 & 0 \\ 0 & 0 & 4\nu \frac{\partial \rho_{G(e)}^{(\alpha)}}{\partial x_2} \Big|_0 \end{bmatrix} \dots\dots\dots (B.18)$$

式 (B.17) および式 (B.18) のテンソルを  $xyz$  全体座標系で表示すれば

For screw dislocation :

$$\begin{aligned}\sigma_{(s)}^{(\alpha)} &= \frac{\mu \tilde{b}^{(\alpha)} \bar{r}^2}{4} \left[ -\left( \nabla_{(l)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \Big|_0 \cdot \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \left( \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) - \left( \nabla_{(l)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \Big|_0 \cdot \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \left( \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \right. \\ &\quad \left. + \left( \nabla_{(l)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \Big|_0 \cdot \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \left( \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right) + \left( \nabla_{(l)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \Big|_0 \cdot \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \left( \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \right] \dots\dots\dots (B.19)\end{aligned}$$

For edge dislocation :

$$\sigma_{(e)}^{(\alpha)} = \frac{\mu \tilde{b}^{(\alpha)} \bar{r}^2}{8(1-\nu)} \left[ 3 \left( \nabla_{(l)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \Big|_0 \cdot \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \left( \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right) + \left( \nabla_{(l)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \Big|_0 \cdot \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \left( \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \right]$$

$$\begin{aligned}
& + 4\nu \left( \nabla_{(l)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \Big|_0 \cdot \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \left( \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \\
& - \left( \nabla_{(l)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \Big|_0 \cdot \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \left( \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right) - \left( \nabla_{(l)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \Big|_0 \cdot \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \left( \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \Big] \dots \dots \dots (B.20)
\end{aligned}$$

となる。ただし、こう配の演算は前述のように初期配置  $\beta_{(l)}$  の座標に関して行わねばならない。Bayley ら<sup>(112)</sup> は、らせん転位および刃状転位がそれぞれ寄与する背応力テンソル  $\mathbf{T}_{b(l)}$  をすべり系ごとの量である式 (B.19) および式 (B.20) の和として次のように定義している。

$$\mathbf{T}_{b(l)} \equiv -(\sigma_{(s)} + \sigma_{(e)}) = - \sum_{\alpha} \left( \sigma_{(s)}^{(\alpha)} + \sigma_{(e)}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (B.21)$$

ただし、背応力は後続の転位運動に対して逆力として働くことを考慮して負符号を付している。分解背応力  $\tau_b^{(\alpha)}$  は式 (B.21) における  $\mathbf{T}_{b(l)}$  の  $\alpha$  すべり系への射影として次のように与えられる。

$$\tau_b^{(\alpha)} = \mathbf{T}_{b(l)} \cdot \left( \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (B.22)$$

以上の Bayley ら<sup>(112)</sup> の定義では、 $\tau_b^{(\alpha)}$  に  $\alpha$  すべり系以外の転位に起因した背応力も含まれているため、すべり系間相互作用を考慮した背応力モデルといえる。なお、Bayley ら<sup>(112)</sup> はこの背応力モデルを”*Full internal stress formulation*”と称している。

一方、Evers ら<sup>(111)</sup> は  $\alpha$  すべり系の分解背応力  $\tau_b^{(\alpha)}$  に同すべり系上のらせん・刃状転位が寄与するせん断応力成分のみ、すなわち式 (B.19) 右辺括弧内第3項および式 (B.20) 右辺括弧内第4項のみを考慮して、 $\tau_b^{(\alpha)}$  を次のように定義している。

$$\begin{aligned}
\tau_b^{(\alpha)} & \equiv \left[ - \left( \sigma_{(s)32}^{(\alpha)} + \sigma_{(e)12}^{(\alpha)} \right) \left( \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \right] \cdot \left( \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \\
& = - \left[ \frac{\mu \tilde{b}^{(\alpha)} \bar{r}^2}{4} \left( \nabla_{(l)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \Big|_0 \cdot \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) - \frac{\mu \tilde{b}^{(\alpha)} \bar{r}^2}{8(1-\nu)} \left( \nabla_{(l)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \Big|_0 \cdot \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \right] \left( \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \cdot \left( \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \\
& = - \frac{\mu \tilde{b}^{(\alpha)} \bar{r}^2}{4} \left[ \left( \nabla_{(l)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \Big|_0 \cdot \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) - \frac{1}{2(1-\nu)} \left( \nabla_{(l)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \Big|_0 \cdot \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \right] \dots \dots \dots (B.23)
\end{aligned}$$

以上の Evers ら<sup>(111)</sup> の定義では  $\tau_b^{(\alpha)}$  にすべり系間相互作用およびせん断以外の応力成分は考慮されておらず、Bayley ら<sup>(112)</sup> はこのモデルを”*Self – internal back stress formulation*”と称している。4.2節ではこのモデルを考えており、 $\bar{r}$  が特性長に該当する。

## 補足 C

# 6章の補足

### C.1 高次モデルの別解法(1)

FEMで解くべき支配方程式系として、式(5.18)および式(5.25)の離散化を述べる。なお、本節で示す手法の基本的な考え方はKuroda-Tvergaard<sup>(139)</sup>、Kuroda<sup>(140)</sup>に基づいている。

まず、式(5.18)および式(5.25)を再掲する。

$$\int_{\mathcal{V}} \left[ \overset{\circ}{\mathbf{T}} - (\mathbf{D}\mathbf{T} + \mathbf{T}\mathbf{D}) + \mathbf{L}\mathbf{T} \right] \cdot \check{\mathbf{L}} \, dv = \oint_{\mathcal{S}} \overset{\circ}{\mathbf{t}} \cdot \check{\mathbf{v}} \, da \dots\dots\dots (C.1)$$

$$\left. \begin{aligned} \int_{\mathcal{V}} \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \check{\rho} \, dv &= -\frac{1}{\check{b}^{(\alpha)}} \int_{\mathcal{V}} (\text{grad } \check{\rho} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv - \frac{1}{\check{b}^{(\alpha)}} \int_{\mathcal{V}} \check{\rho} (\text{div } \mathbf{t}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv + \frac{1}{\check{b}^{(\alpha)}} \oint_{\mathcal{S}} \check{\rho} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, da \\ \int_{\mathcal{V}} \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \check{\rho} \, dv &= \frac{1}{\check{b}^{(\alpha)}} \int_{\mathcal{V}} (\text{grad } \check{\rho} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv + \frac{1}{\check{b}^{(\alpha)}} \int_{\mathcal{V}} \check{\rho} (\text{div } \mathbf{s}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dv - \frac{1}{\check{b}^{(\alpha)}} \oint_{\mathcal{S}} \check{\rho} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, da \end{aligned} \right\} (C.2)$$

ここで、式(C.1)の離散化は従来の転位-結晶塑性FEM解析における離散化と同様に、式(6.44)、式(6.66)および式(6.70)を用いて次のように行われる。

$$[\mathbf{K}_{vv}^E] \{ \mathbf{v}_{nd} \} = \{ \dot{\mathbf{f}}_{vnd}^E \} \dots\dots\dots (C.3)$$

一方、式(C.2)は、Kuroda-Tvergaard<sup>(139)</sup>、Kuroda<sup>(140)</sup>の手法に従って2式をそれぞれ離散化した後、一つの式にまとめれば次のように書ける。

$$[\mathbf{K}_{\rho}^E] \{ \dot{\rho}_{nd}^{(\alpha)} \} = \{ \dot{\mathbf{g}}_{\rho nd}^{(\alpha)E} \} \dots\dots\dots (C.4)$$

ここで、 $\alpha$ すべり系のGN転位密度の速度の各成分を

$$\{ \dot{\rho}^{(\alpha)} \} \equiv \{ \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \quad \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \}^T = [\overline{N}_{\rho}] \{ \dot{\rho}_{nd}^{(\alpha)} \} \dots\dots\dots (C.5)$$

$$\{ \dot{\rho}_{nd}^{(\alpha)} \} \equiv \{ \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)1} \quad \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)1} \quad \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)2} \quad \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)2} \quad \dots \quad \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)n_{nd}} \quad \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)n_{nd}} \}^T \dots\dots\dots (C.6)$$

$$[\overline{N}_{\rho}] \equiv \begin{bmatrix} N^1 & 0 & N^2 & 0 & \dots & N^{n_{nd}} & 0 \\ 0 & N^1 & 0 & N^2 & \dots & 0 & N^{n_{nd}} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (C.7)$$

と補間・離散化しており、式(C.4)の残りの行列は

$$[\mathbf{K}_{\rho}^E] \equiv \int_{\mathcal{V}} [\overline{N}_{\rho}]^T [\overline{N}_{\rho}] \, dv \dots\dots\dots (C.8)$$

および

$$\{\dot{\mathbf{g}}_{\rho\text{nd}}^{(\alpha)\text{E}}\} \equiv \int_{\mathcal{V}} [\overline{\mathbf{B}}_{\rho}]^{\text{T}} \{\dot{\overline{\mathbf{p}}}_{\rho}^{(\alpha)}\} \text{d}v + \int_{\mathcal{V}} [\overline{\mathbf{N}}_{\rho}]^{\text{T}} \{\dot{\overline{\mathbf{q}}}_{\rho}^{(\alpha)}\} \text{d}v + \oint_{\mathcal{S}} [\overline{\mathbf{N}}_{\rho}]^{\text{T}} \{\dot{\overline{\mathbf{n}}}_{\rho}^{(\alpha)}\} \text{d}a \dots\dots\dots (\text{C.9})$$

と表される．ここで，

$$[\overline{\mathbf{B}}_{\rho}] \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial N^1}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial x} & 0 & \dots & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial x} & 0 \\ \frac{\partial N^1}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial y} & 0 & \dots & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial y} & 0 \\ \frac{\partial N^1}{\partial z} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial z} & 0 & \dots & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial z} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial x} & \dots & 0 & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial x} \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial y} & \dots & 0 & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial y} \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial z} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial z} & \dots & 0 & \frac{\partial N^{n_{\text{nd}}}}{\partial z} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (\text{C.10})$$

$$\{\dot{\overline{\mathbf{p}}}_{\rho}^{(\alpha)}\} \equiv \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \left\{ s_x^{(\alpha)} \quad s_y^{(\alpha)} \quad s_z^{(\alpha)} \quad -t_x^{(\alpha)} \quad -t_y^{(\alpha)} \quad -t_z^{(\alpha)} \right\}^{\text{T}} \dots\dots\dots (\text{C.11})$$

$$\{\dot{\overline{\mathbf{q}}}_{\rho}^{(\alpha)}\} \equiv \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \left\{ \text{div } \mathbf{s}^{(\alpha)} \quad -\text{div } \mathbf{t}^{(\alpha)} \right\}^{\text{T}} \dots\dots\dots (\text{C.12})$$

$$\{\dot{\overline{\mathbf{n}}}_{\rho}^{(\alpha)}\} \equiv \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \left\{ -(\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)}) \quad (\mathbf{n} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)}) \right\}^{\text{T}} \dots\dots\dots (\text{C.13})$$

である．ただし，式 (C.11) 右辺の各成分は結晶基底  $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ ， $\mathbf{t}^{(\alpha)}$  の  $xyz$  正規直交座標系における成分である．なお，本節と 6 章の双方に現れる記号は同一のものである．

時間に関しては式 (6.72) を用いて離散化を行えば，式 (C.3) および式 (C.3) は次のように増分形で表される．

$$[\mathbf{K}_{\text{vv}}^{\text{E}}] \{\Delta \mathbf{u}_{\text{nd}}\} = \{\Delta \mathbf{f}_{\text{vnd}}^{\text{E}}\} \dots\dots\dots (\text{C.14})$$

$$[\mathbf{K}_{\rho}^{\text{E}}] \{\Delta \rho_{\text{nd}}^{(\alpha)}\} = \{\Delta \mathbf{g}_{\rho\text{nd}}^{(\alpha)\text{E}}\} \dots\dots\dots (\text{C.15})$$

ここで，式 (C.15) 右辺の  $\{\Delta \mathbf{g}_{\rho\text{nd}}^{\text{E}}\}$  は，式 (C.9)～式 (C.13) において  $\dot{\gamma}^{(\alpha)} \rightarrow \Delta \gamma^{(\alpha)}$  と置き換えたものである．

最後に，対象とする構造全体に対して式 (C.14) および式 (C.15) の和をとれば，解くべき増分形の支配方程式が次のように得られる．

$$[\mathbf{K}_{\text{vv}}] \{\Delta \mathbf{u}\} = \{\Delta \mathbf{f}_{\text{v}}\} \dots\dots\dots (\text{C.16})$$

$$[\mathbf{K}_{\rho}] \{\Delta \rho^{(\alpha)}\} = \{\Delta \mathbf{g}_{\rho}^{(\alpha)}\} \dots\dots\dots (\text{C.17})$$

実際に上の 2 式を用いて FEM 解析を行う場合，本来は式 (C.16) および式 (C.17) は連成して解く必要がある．しかしながら，すべり速度硬化則に式 (4.31) のような粘塑性形モデルを用いる場合に



は,  $\hat{\tau}^{(a)}$  および  $\Delta\gamma^{(a)}$  の項の相関関係により式 (C.16) および式 (C.17) はそれぞれ独立に解くことができる. また, この支配方程式系を解く際の物質点の自由度は, 速度  $\boldsymbol{v}$  および GN 転位密度の速度  $\dot{\rho}_{G(e)}^{(a)}$ ,  $\dot{\rho}_{G(s)}^{(a)}$  となる.

## 補足D

# 7章の補足

### D.1 メッシュ依存性に関する要素の選択

7.2.1項におけるFEM解析ではメッシュ分割に9節点四辺形要素を使用していた。そこで、その他の要素を選択した場合の解析結果について簡単に述べる。9節点四辺形要素は2次の補間関数を用いる2次要素であるため、その比較として1次の四辺形要素である4節点四辺形要素を用いた際と同条件における解析結果を示す。

図D.1はスケール比 $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$ （特性長 $r = 1.0 \mu\text{m}$ ）とした場合の公称応力-ひずみ線図であり、図D.2はその解析における底面系の(a)すべり分布および(b)GN転位密度の刃状成分分布である。なお、図D.1には9節点要素を用いた際に各メッシュ分割でほぼ一致した結果（図7.20参照）も合わせて示している。図D.1より、4節点要素を用いた場合にはスケール比を $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$ としてもメッシュ依存性は取り除かれず、応力経路は異なったものとなっていることがわかる。ただし、細かなメッシュ分割を用いた際には、その結果は9節点要素の結果に収束していることも確認できる。また図D.2より、各メッシュ分割における諸量の分布および大きさにもメッシュ依存性がみられ、特に最も粗い $5 \times 30$ 分割ではキンク帯と判断できる変形帯は形成されていない。さらに図D.2を図7.21および図7.22と比較すると、 $10 \times 60$ 分割より細かなメッシュ分割で形成されたキンク帯の幅もわずかではあるが異なっていることがわかる。例えば、 $15 \times 90$ 分割における4節点要素と9節点要素の結果を比べれば、図D.2に示す4節点要素におけるキンク帯の幅の方が大きなものとなっている。ここで、9節点要素を用いた際には、 $\varepsilon_s = 2.8 \times 10^{-3}$ とした図7.18および図7.19の結果において、メッシュ依存性はみられるものの各メッシュ分割におけるキンク帯の幅にはそれほど大きな違いは見受けられなかった。したがって、図D.2のメッシュ依存性は低次数の要素を用いたための解の収束性の悪さが原因であり、より精度のよい計算をするためにはさらに細かいメッシュ分割を用いる必要があると考えられる。

図D.3および図D.4はスケール比 $\varepsilon_s = 1.1 \times 10^{-2}$ （特性長 $r = 2.0 \mu\text{m}$ ）とした場合の解析結果であり、この結果においても先ほどと同様にメッシュ依存性は十分に取り除かれていないことがわかる。しかしながら、図D.3をみると公称応力-ひずみ線図は9節点要素を用いた際の結果に近付いていることもわかる。これは、前述のように特性長が大きくなるにつれてキンク帯の幅は大きなものとなり、キンク帯の構造上の曲率が低減したためと考えられる。すなわち、数値計算においてキンク帯を表現するために必要な一要素の担う幾何学的な曲率が低減したため、粗いメッシュ

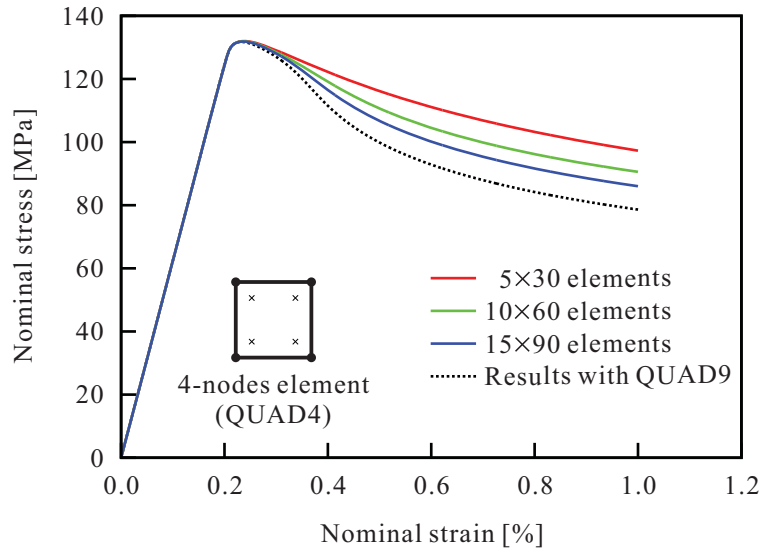


Fig. D.1 Nominal stress - strain curves using 4-nodes element with  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$  ( $r = 1.0 \mu\text{m}$ ).

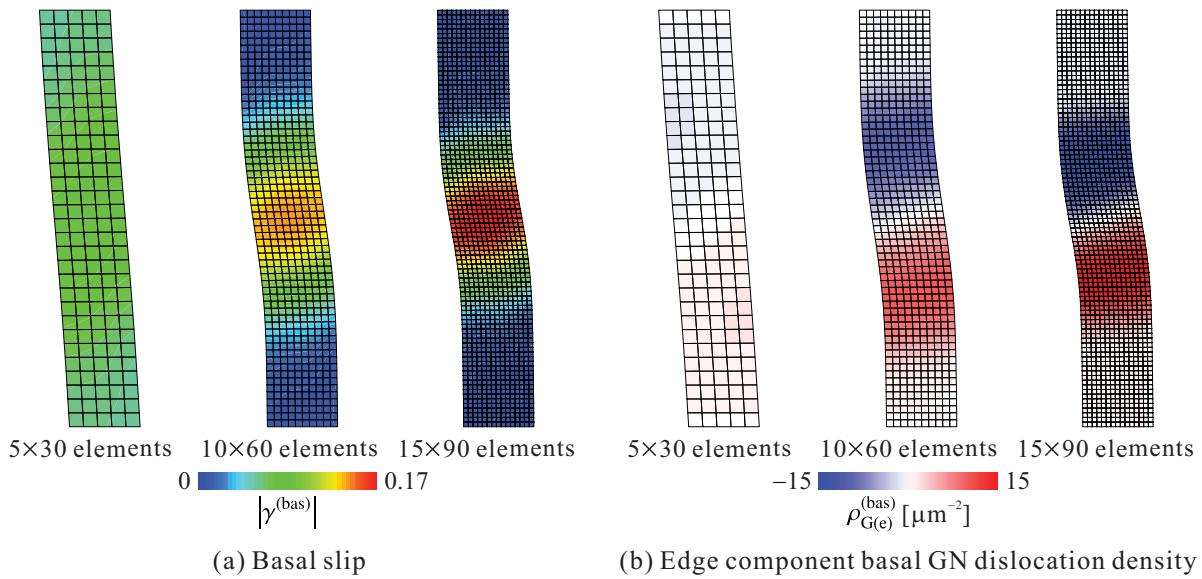


Fig. D.2 Each value using 4-nodes element with  $\varepsilon_s = 5.6 \times 10^{-3}$  ( $r = 1.0 \mu\text{m}$ ) at  $\varepsilon = 1.0\%$ .

分割を用いてもある程度の精度で計算が行われた結果である。例えば、図 D.2 ではキンク境界における曲率が大きいため、それを 1 次要素にて再現するためには細かなメッシュ分割が必要であることに対して、図 D.4 では曲率が比較的小さいため、ある程度粗いメッシュ分割でもそれなりの精度でキンクを表現できているのである。ただし、図 D.3 のように  $15 \times 90$  分割を用いても解は 9 節点要素の結果に十分に収束していないため、キンク変形の数値解析にはなるべく高次数の要素を用いることが望ましいと考えられる。

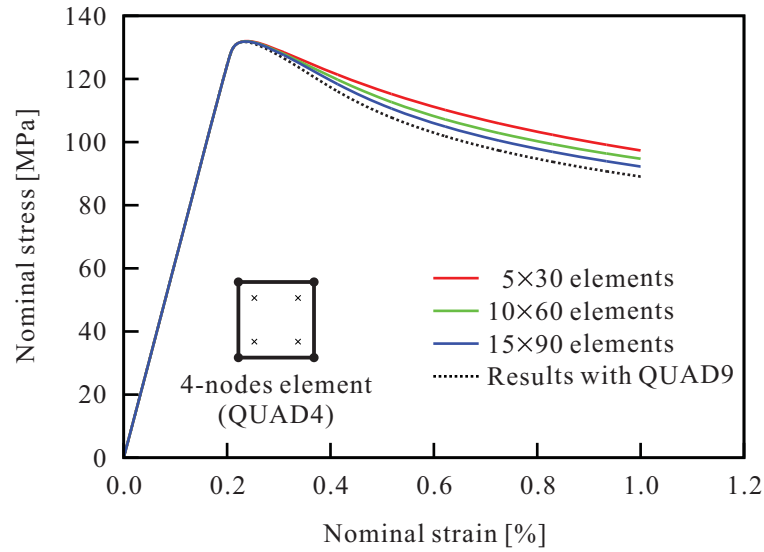


Fig. D.3 Nominal stress - strain curves using 4-nodes element with  $\varepsilon_s = 1.1 \times 10^{-2}$  ( $r = 2.0 \mu\text{m}$ ).

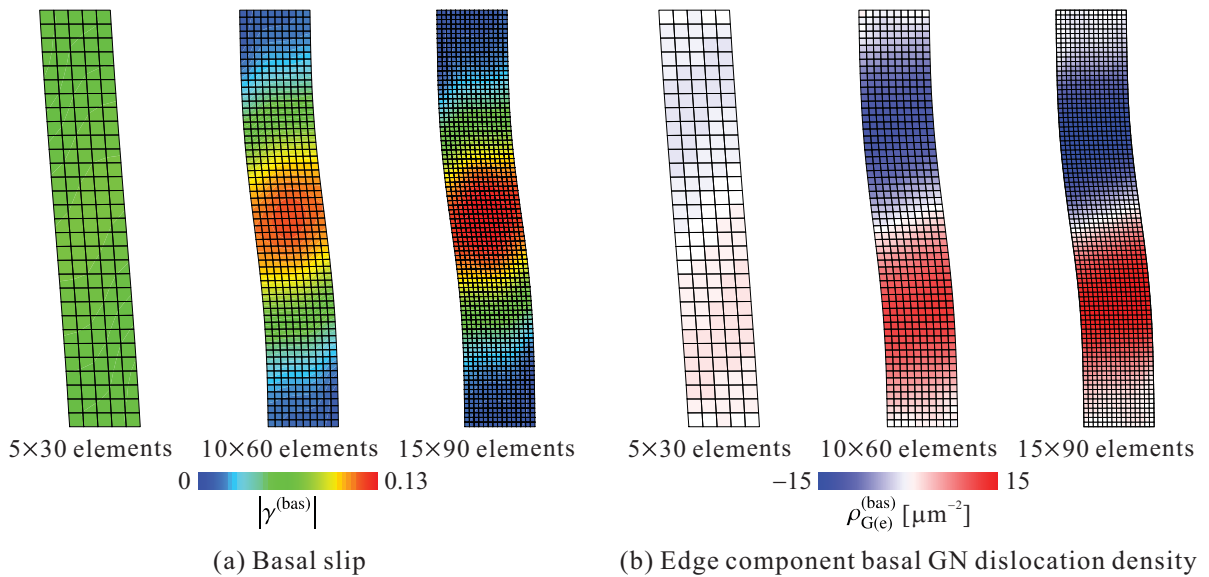


Fig. D.4 Each value using 4-nodes element with  $\varepsilon_s = 1.1 \times 10^{-2}$  ( $r = 2.0 \mu\text{m}$ ) at  $\varepsilon = 1.0\%$ .

## D.2 高次モデルの別解法 (2)

補足 C.1 で述べたように，本高次モデルは式 (C.16) および式 (C.17) に基づく支配方程式系の離散化を行うことによって解くことができる．そこで本節では，補足 C.1 に示した高次モデルの別解法を用いた際に得られる解析結果を示し，式 (6.79) を用いた 7.2 節の解析結果との比較を行う．

解析対象は図 7.2 に示した Mg 基 LPSO 相単結晶とし，初期結晶方位には同図 (b) に示すものを設定する．また，式 (C.16) および式 (C.17) に基づく離散化では，式 (5.15)<sub>1</sub> の通常速度および表面力速度に対する境界条件に加えて，5.2 節 (b) 項にて述べた高次量に対する境界条件が要請される．

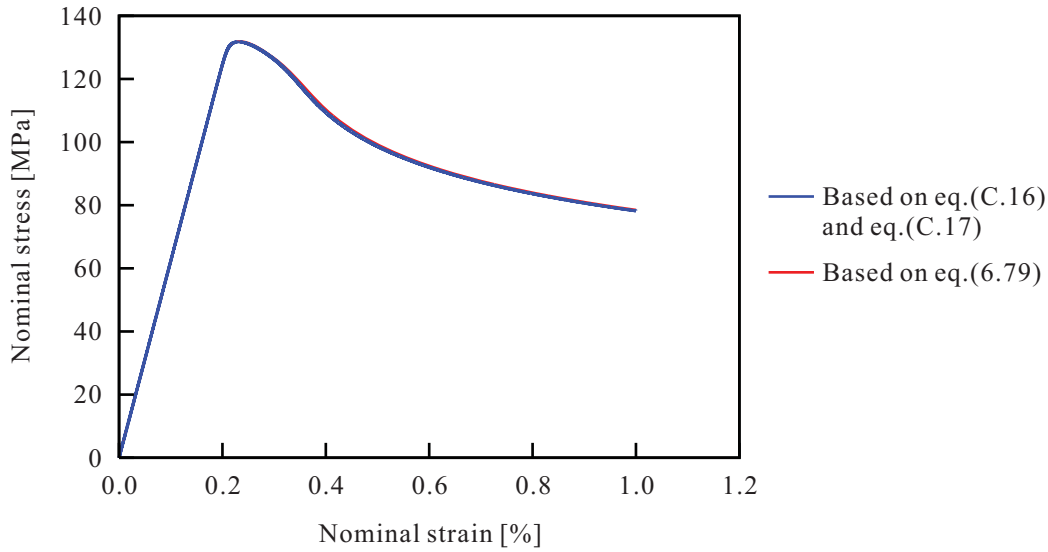


Fig. D.5 Nominal stress - strain curves based on discretization of two ways.

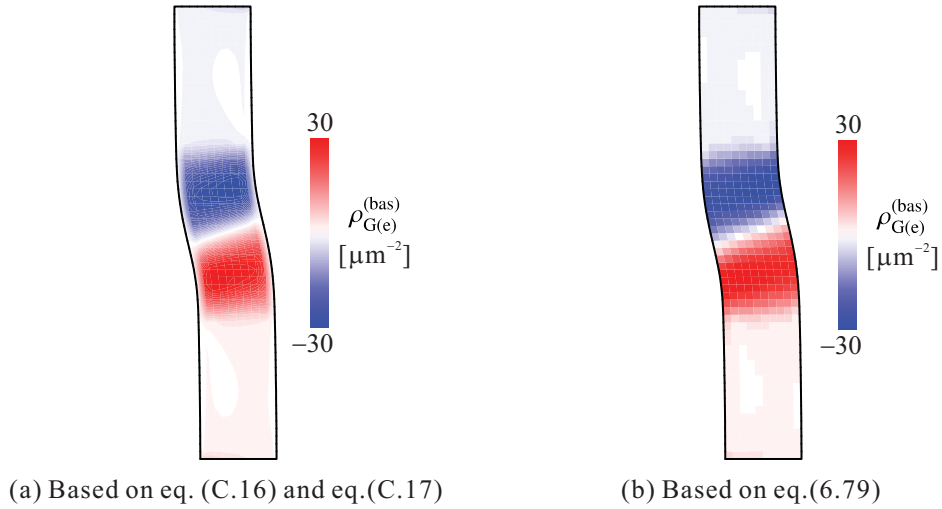
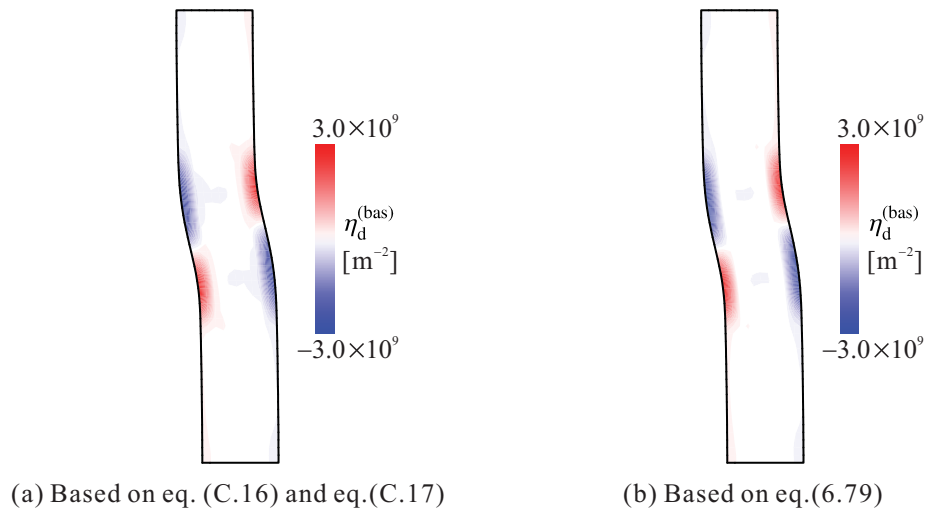
本解析では、速度および表面力速度に対する境界条件は図 7.2(a) で示すものとし、高次量の境界条件には 5.2 節で述べた式 (5.26) を適用する。その際、7.2.2 項で述べた実験条件との対比から次に示す条件を適用する。

$$\left. \begin{array}{l} \dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} = 0, \quad \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} = 0 \quad \text{at } x = 0, x = W, y \neq 0, y \neq H \\ \left( \mathbf{n} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)} \right) \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0, \quad \left( \mathbf{n} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)} \right) \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \quad \text{at } y = 0, y = H \end{array} \right\} \dots\dots\dots (D.1)$$

高次量に対するこのような境界条件は、図 7.29 に示すものと整合している。

材料の物性値および数値パラメータには表 7.1 に示す値を使用し、解析領域のメッシュ分割には図 7.3(b) を用いる。また、特性長および特性長比はそれぞれ  $r = 1.0 \mu\text{m}$  および  $\varepsilon_s = 0.1$  とする。なお、補足 C.1 に示した支配方程式系の離散化過程には 6.1 節で述べたような接線係数法を適用していない。そこで本解析では、完全陽解法により増分解析を安定的に行うために時間増分幅  $\Delta t$  に  $\Delta t \sim 10^{-4} \text{ s}$  程度の小さな値を使用する。また、それにともない  $r_{\min}$  法におけるすべり増分の許容値を  $\Delta\gamma_{\text{tol}} = 2.0 \times 10^{-4}$  に設定する。なお、結晶基底の更新および  $r_{\min}$  法の適用は 6 章で述べたものと同様に行う。

図 D.5 は本解析によって得られた公称応力-ひずみ線図であり、比較のために式 (6.79) を用いた 7.2 節の結果も掲載している。同図より、支配方程式の 2 通りの離散化に基づく FEM 解析の結果はほとんど一致していることがわかる。これは、これら 2 通りの離散化が同一の式 (5.13) を出発点としているため、それらの解は理論上等価であることを考えれば当然の結果である。ただし、これら 2 通りの離散化では、高次量に関する物質点の自由度がそれぞれ異なる。このことにより、FEM において式 (C.16) および式 (C.17) に示すモデルでは、GN 転位密度が節点量となる一方で、式 (6.79) に基づくモデルでは GN 転位密度は積分点の量となる。GN 転位密度は、例えば式 (4.37) のように加工硬化に寄与するが、その硬化の大きさは積分点にて計算される。したがって、GN 転位密度は積分点においても評価されなければならないため、前述の GN 転位密度の節点量・積分点量に関する

Fig. D.6 Edge component of basal GN dislocation density based on discretization of two ways ( $\varepsilon = 1.0\%$ ).Fig. D.7 Wedge disclination component of incompatibility [eq.(7.6)] based on discretization of two ways ( $\varepsilon = 1.0\%$ ).

違いにより、わずかではあるが図 D.5 のような応力-ひずみ線図の差が生じたものと考えられる。

また、図 D.6 は 2 通りの離散化に基づく解析により得られた底面系の GN 転位密度の刃状成分分布である。ここで、上述のように GN 転位密度は同図 (a) では節点量となるためコンター表示を、同図 (b) では積分点量となるためデジタル表示をしている。同図より、式 (C.16) および式 (C.17) に基づいた解析では、GN 転位密度が自由表面において零となることが陽に示されていることがわかる。したがって、この場合には回位密度の計算において 7.4 節で述べるような自由表面上の GN 転位密度値を零に再設定する操作は不要となる。また、その際に式 (7.6) を用いると、図 D.7(a) に示すように同図 (b) または図 7.61(b) にほぼ等しい回位密度分布が得られる。なお、図 D.6 では、計算結果の出力表示上の問題により自由表面における 2 通りの解析解が全く異なるように表されて

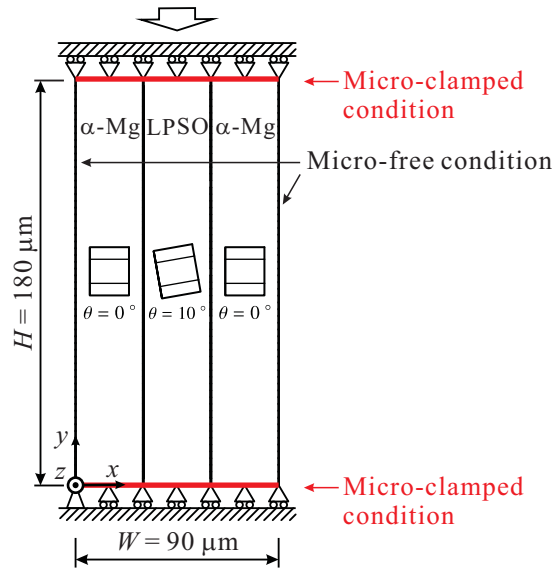


Fig. D.8 Computational model for polycrystal of  $\alpha$ -Mg / LPSO two phase alloy.

いるが、これらの計算は理論上等価であることを述べておく。また、以上の考察は特性長の値を変化させても同様に成り立ち、また式 (C.16) および式 (C.17) に基づく離散化を行った場合にも 7 章に示す議論は同様に行うことができる。

### D.3 双晶変形を無視した二相合金に対する FEM 解析

本節では、 $\alpha$ -Mg 相と LPSO 相の二相で構成される LPSO 型 Mg 合金の多結晶に対する解析を行う。ただし、本解析では  $\alpha$ -Mg 相で生じると考えられる双晶変形を無視しており、実際の材料の変形挙動に即さない。したがって、ここでは試行的な解析例として記すにとどめる。

図 D.8 は解析対象の多結晶を表しており、試験片は LPSO 相が両側から  $\alpha$ -Mg 相に挟まれた形で構成される。初期結晶方位は同図中に示すとおりであり、メッシュ分割は 7.3 節の解析と同様に 8 節点四辺形要素を用いて  $30 \times 60$  分割する。また、材料定数および数値パラメータは表 7.1 に示す値を各相に用いる。ただし、 $\alpha$ -Mg 相における CRSS は LPSO 相のものに比べて小さいため、その値には表 D.1 を用いる。特性長比は  $\varepsilon_1 = 0.1$  とし、ここでは特性長を  $r = 0$  および  $r = 1.0 \mu\text{m}$  とした場合の解析結果をそれぞれ示す。

図 D.9 は本解析により得られた公称応力-ひずみ線図であり、特性長の値に関わらず 7.3 節と同様に結晶粒界上ですべり拘束条件を用いた場合に大きな公称応力が示されている。また、図 D.10

TableD.1 CRSS of each slip system in  $\alpha$ -Mg phase.

	Basal	Prismatic	Pyramidal
CRSS [MPa]	0.9744	56.155	63.122



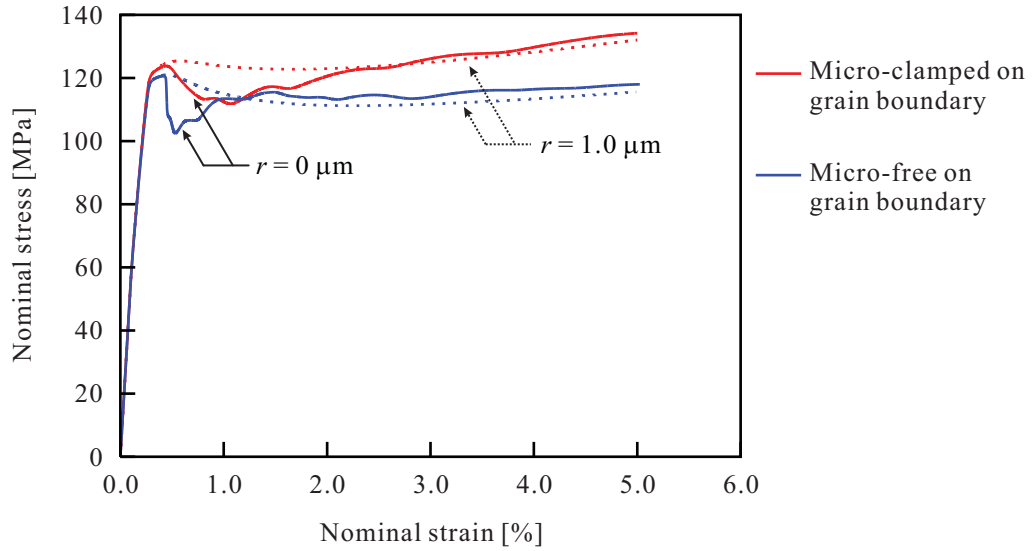


Fig. D.9 Nominal stress - strain curves for polycrystal of two phase alloy dependent on boundary condition for slip rate on grain boundary.

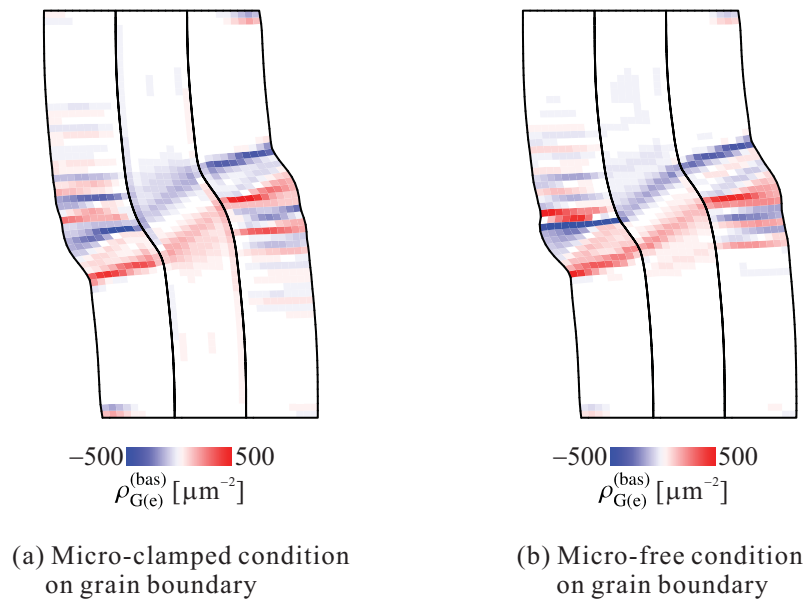


Fig. D.10 Edge component of basal GN dislocation density with  $r = 0 \mu\text{m}$  and each boundary condition on grain boundary ( $\varepsilon = 5.0\%$ ).

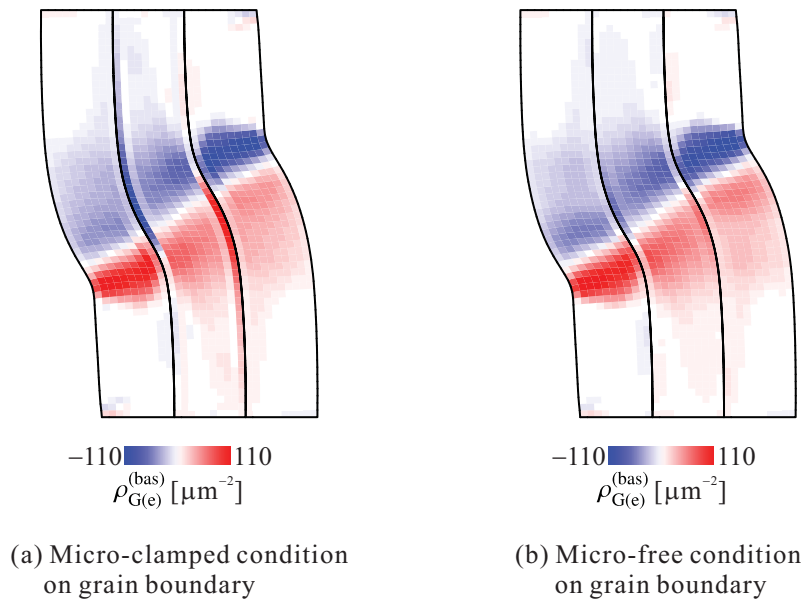


Fig. D.11 Edge component of basal GN dislocation density with  $r = 1.0 \mu\text{m}$  and each boundary condition on grain boundary ( $\varepsilon = 5.0\%$ ).

および図 D.11 は各特性長にそれぞれ対応する 5.0% 圧縮後の底面系の GN 転位密度の刃状成分分布である。まず、図 D.10 より特性長が零、すなわち高次応力が考慮されない従来の解析結果では、粒界におけるすべり速度の境界条件に依らず  $\alpha\text{-Mg}$  相の自由表面上でくさび状のキンク変形が生じていることがわかる。また、 $\alpha\text{-Mg}$  相は CRSS が小さく塑性変形を生じやすいため、LPSO 相よりも GN 転位が高密度で蓄積していることがわかる。なお、特性長を零としたこの解析結果には、7.2.1 項で示したようにメッシュ依存性が発現する。一方、図 D.11 より特性長が  $r = 1.0 \mu\text{m}$  の場合には、7.3 節の解析結果と同様に試験片を横断するキンク帯が 1 つだけ形成している。また、結晶粒界における GN 転位の堆積などの傾向も 7.3 節の結果と一致している。図 D.10 および図 D.11 を比較すると、特性長を零とした場合には変形の局所化が進み転位密度の値が大きくなっていることがわかる。それにより加工硬化が生じ、図 D.9 に示すように変形の途中で  $r = 1.0 \mu\text{m}$  における公称応力を超えたものと考えられる。

以上のように、二相合金に対する解析では CRSS が小さい  $\alpha\text{-Mg}$  相において活発な変形が生じる。したがって、 $\alpha\text{-Mg}$  相の塑性変形挙動を正確に再現するために、二相合金に対する解析では双晶モデルを導入すべきと考えられる。