

結晶塑性に関する Taylor–Bishop–Hill 理論の一般化と ひずみ速度依存型結晶塑性モデル

関根 和喜*・井上 博史*²

A Generalization of the Taylor–Bishop–Hill Theories and the Rate-dependent Slip Model in Crystal Plasticity

Kazuyoshi SEKINE and Hirofumi INOUE

Synopsis : In the Taylor–Bishop–Hill theories of crystal plasticity for the prediction of deformation textures, the problem of determining the shear rate on a slip system in a particular crystallite is reduced to the optimization procedures under linear constraints. On the other hand, the rate-dependent slip theory which is modeled by a power law relationship between the shear rate and the resolved shear stress on a slip system is formulated as the non-linear simultaneous equations system with respect to the stresses. It has been recognized to date that the Taylor–Bishop–Hill theories are essentially distinct from the rate-dependent slip one. This paper is to generalize the Taylor theory by considering in terms of the mathematical programming scheme as a norm minimization problem in the finite dimensional Banach space, and then to demonstrate that the rate dependent slip theory is included in such generalized Taylor–Bishop–Hill crystal plasticity ones. Finally, the mathematical formulation for the extended relaxed constraints model including the rate-dependent slips is comprehensively presented based on the generalized Taylor–Bishop–Hill theories.

Key words : crystal plasticity; deformation texture; Taylor–Bishop–Hill theories; rate-dependent slip model; optimization problem; Banach space; relaxed constraints model.

1. はじめに

結晶性材料の変形集合組織の予測と制御を行うには、塑性変形に基づく結晶体各点における現在配置での格子スピンを導出し、その点での方位回転を求める必要がある。それには結晶体各点における活動すべり系とそのすべり速度 (shear rate, $\dot{\gamma}^{(k)}$) を知ればよい。活動すべり系とそのすべり量を決定する方法として、いわゆる“最小せん断和の原理”に基づく Taylor 理論¹⁾が古くから用いられ、多くの知見が得られてきた^{2,3)}。しかしながら、Taylor 流の理論による解析では $\dot{\gamma}^{(k)}$ の唯一解は保証されていない。そのため最近では、いわゆる Asaro と Needleman⁴⁾ によるひずみ速度依存型結晶塑性モデルが導入されている。この結晶すべりモデルでは、幾何学的に可能なすべり系はすべて活動すると考える。そして、各結晶すべり系の分解せん断応力 ($\tau^{(k)}$) とそのすべり速度 ($\dot{\gamma}^{(k)}$) との関係をひずみ速度感受性指数 m ($m > 0$) を用いて、

$$\tau^{(k)} = \tau_0 \operatorname{sgn}(\dot{\gamma}^{(k)}) |\dot{\gamma}^{(k)} / \dot{\gamma}_0|^m \dots \dots \dots (1)$$

のように規定し、最終的には Cauchy 応力 σ_{ij} を変数とする非線形連立方程式問題として定式化されるものである^{5,6)}。ただし、式(1)中の $\operatorname{sgn}(\dot{\gamma}^{(k)})$ は単なる符号関数で、括弧内の数値が正なら + を、またはそれが負なら - を取ること

を意味する。さらに、 τ_0 と $\dot{\gamma}_0$ はすべり系のそれぞれ基準せん断応力と基準すべり速度と呼ばれるが、前者はすべり系の変形抵抗 (slip resistance) の大小に対応するものと解釈されている⁴⁾。

一方、Taylor 流の理論は、結晶体に課せられる変形拘束を制約式とする最適化問題として定式化される^{5,7)}。結晶塑性に関するこれら2つの考え方は、本質的に異なるものとして理解されてきたが、本研究では、Taylor 理論をすべり速度 $\dot{\gamma}^{(k)}$ の組を要素とする“有限次元のパナッハ空間”上でのノルム最小化問題と解釈・一般化することによって、ひずみ速度依存型結晶塑性モデルがこのよう一般化された Taylor 理論に包含されることを示す。さらに、一般化された Taylor 理論をもとに、多結晶塑性モデルの一つである、いわゆる“relaxed constraints モデル^{3,5,7)}”の定式化を試みる。

2. 結晶塑性に関する Taylor 理論の一般化

結晶塑性に関する狭義の Taylor 理論¹⁾では、結晶体に指定される塑性ひずみ (またはひずみ速度テンソル D_{ij}) はすべり系のすべり量 (またはすべり速度 $\dot{\gamma}^{(k)}$) の“重ね合せ”で決まり、この塑性ひずみ (または D_{ij}) を満たすような可能なすべり系の組合せのうち、すべり系のせん断和

平成 10 年 10 月 9 日受付 平成 11 年 1 月 21 日受理 (Received on Oct. 9, 1998; Accepted on Jan. 21, 1999)

* 横浜国立大学工学部 (Faculty of Engineering, Yokohama National University, 79-5 Tokiwadai Hodogaya-ku Yokohama 240-8501)

* 2 大阪府立大学工学部 (Faculty of Engineering, Osaka Prefecture University)

(または $\sum_k |\dot{\gamma}^{(k)}|$) が最小となるものが実現すると考える。これは典型的な線形計画問題として定式化できるが⁵⁾、すべり速度 $\dot{\gamma}^{(k)}$ の重ね合せの特性、すなわち線形性に着目すれば、以下に示すような一般化が可能となる。

結晶体の N 個の各すべり系上でのすべり速度 $\dot{\gamma}^{(k)}$ の組 $(\dot{\gamma}^{(1)}, \dot{\gamma}^{(2)}, \dot{\gamma}^{(3)}, \dots, \dot{\gamma}^{(N)})$ の全体からなる集合、すなわち N 次元実ベクトル空間 (実線形空間) を考え、その原点を Γ_0 とする。すなわち、

$$\Gamma = (\dot{\gamma}^{(1)}, \dot{\gamma}^{(2)}, \dot{\gamma}^{(3)}, \dots, \dot{\gamma}^{(N)}) \in V^N$$

$$\Gamma_0 = (0, 0, 0, \dots, 0) \in V^N \dots \dots \dots (2)$$

この実ベクトル空間に2点間の長さを測る量、すなわち距離関数 $d(\Gamma_1, \Gamma_2)$ またはノルム $\|\Gamma\|$ を導入すると、Taylor 理論は Γ 空間 (N 次元バナッハ空間⁸⁾) において、点 Γ_0 (原点) から点 Γ までの距離 $d(\Gamma_0, \Gamma)$ を最小化する以下のような制約付き最適化問題と解釈される。

$$E_T(\Gamma) = d(\Gamma_0, \Gamma) \rightarrow \text{minimize}$$

subject to

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N (m_{ij}^{(k)} + m_{ji}^{(k)}) \dot{\gamma}^{(k)} \dots \dots \dots (3)$$

ただし、 D_{ij} は結晶体各点での塑性ストレッチングで $m_{ij}^{(k)}$ は、 k 番目のすべり系のすべり方向とすべり面法線方向の単位ベクトルをそれぞれ $\mathbf{b}^{(k)}$ と $\mathbf{n}^{(k)}$ としたとき、 $\mathbf{m}^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)} \otimes \mathbf{n}^{(k)}$ で与えられる、いわゆる Schmid テンソルである。

いま、すべり速度空間の各点 $\Gamma = (\dot{\gamma}^{(1)}, \dot{\gamma}^{(2)}, \dot{\gamma}^{(3)}, \dots, \dot{\gamma}^{(k)})$ に対し、

$$\|\Gamma\|_p = \left(\sum_{k=1}^N |\dot{\gamma}^{(k)}|^p \right)^{1/p} \dots \dots \dots (4)$$

なるノルム (p -norm と呼ぶ) を定義する⁸⁾。ただし、 p は $1 \leq p < \infty$ を満たす実数である。また、 $p = \infty$ に対しては、

$$\|\Gamma\|_\infty = \max_{k=1,2,\dots,N} |\dot{\gamma}^{(k)}| \dots \dots \dots (5)$$

を定義しよう⁸⁾。

点 Γ に付与された p -norm は、原点と点 Γ 間の距離 (metric) と同値であるから、(3) 式で記述される一般化 Taylor 理論は、以下のように p -norm が付与されたバナッハ空間上でのノルム最小化問題として書き下せる。

$$E_T(\Gamma) = \tau_0 \left(\sum_{k=1}^N |\dot{\gamma}^{(k)}|^p \right)^{1/p} \rightarrow \text{minimize}$$

subject to

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N (m_{ij}^{(k)} + m_{ji}^{(k)}) \dot{\gamma}^{(k)} \dots \dots \dots (6)$$

ここでは目的関数に内部塑性仕事率の意味を持たせるた

め、式(3)の目的関数にすべり系の変形抵抗値 τ_0 を乗じておいた。また、 $p=1$ と置けば (Manhattan norm), 目的関数中の定数項 τ_0 は通常ひずみ速度非依存型におけるすべり系の臨界せん断応力値となり、(6) 式の問題は狭義の Taylor 理論に完全に一致する。

3. ひずみ速度依存型結晶塑性論の導出

2の(6)式で定義された制約付き最適化問題を主問題とすると、その双対問題は数理計画法の双対性定理⁹⁾ を使って、以下のように書くことができる (文末の付録参照)。

$$E_{BH}(\sigma_{ij}) = D_{ij} \sigma_{ij} \rightarrow \text{maximize}$$

subject to

$$\frac{1}{2} (m_{ij}^{(k)} + m_{ji}^{(k)}) \sigma_{ij} (= \tau^{(k)}) = (\tau_0 / A) \text{sgn}(\dot{\gamma}^{(k)}) |\dot{\gamma}^{(k)}|^{p-1}$$

and

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N (m_{ij}^{(k)} + m_{ji}^{(k)}) \dot{\gamma}^{(k)} \dots \dots \dots (7)$$

ここで、上式中一つの単項式について同じ下添字が繰返し使用されている場合、その下添字について和を取るという総和規約が採用されている。以後、下添字についてのこの総和規約を適用する。また、 A は相当ひずみ速度に対応する定数項で、 σ_{ij} は数理計画法ではラグランジュ乗数と呼ばれ、これは Cauchy 応力としての意味をもつ。ただし、(7) 式の導出においては “超関数の意味の導関数¹⁰⁾”

$$\frac{d|\dot{\gamma}^{(k)}|}{d\dot{\gamma}^{(k)}} = \text{sgn}(\dot{\gamma}^{(k)}) \dots \dots \dots (8)$$

を用いた。したがって、(7) 式中での $\text{sgn}(\dot{\gamma}^{(k)})$ は式(1)で用いられている単なる符号関数とは異なり、Fig. 1 に示されるように $\dot{\gamma}^{(k)} < 0$ で -1 , $\dot{\gamma}^{(k)} > 0$ で $+1$ で、かつ $\dot{\gamma}^{(k)} = 0$ においては -1 と $+1$ との間の任意の数値を取るという “一般化された関数” となる。また、式(7)の最適化問題は式(6)のそれと等価であり、一般化された “Bishop-Hill 理論¹¹⁾” としての意味をもつ。

塑性ストレッチング D_{ij} の成分の全てが指定されかつ $p > 1$ の場合、式(7)の問題の制約式群を応力 σ_{ij} のみの一組の連立方程式としてまとめることができ、最適化問題は次のように書き直せる。

$$E_{BH}(\sigma_{ij}) = D_{ij} \sigma_{ij} \rightarrow \text{minimize}$$

subject to

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{A}{\tau_0} \right)^{1/(p-1)} \sum_{k=1}^N (m_{ij}^{(k)} + m_{ji}^{(k)}) m_{kl}^{(k)} \sigma_{kl} |m_{mn}^{(k)} \sigma_{mn}|^{(2-p)/(p-1)} \dots \dots \dots (9)$$

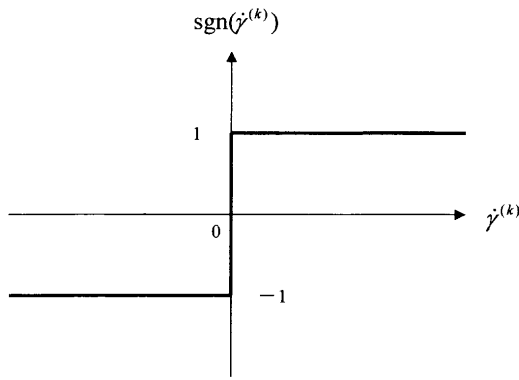


Fig. 1. Derivative of $|\dot{\gamma}^{(k)}|$ as a distribution.

式(8)の制約式中の定数項 A を $A=(\dot{\gamma}_0)^{p-1}$ と置き、ひずみ速度感受性指数 m に関し、 $m=p-1$ ($p \geq 1$) とすれば、従来のひずみ速度依存型結晶塑性理論は式(7)または(9)の最適化問題の制約式群そのものであることが判る。

Fig. 1で定義される数学概念を使うと、 $p=1$ の場合について、式(7)の制約条件式群の第1式は、

$$\tau^{(k)} = \frac{1}{2}(m_{ij}^{(k)} + m_{ji}^{(k)})\sigma_{ij} = \tau_0 \operatorname{sgn}(\dot{\gamma}^{(k)}) \dots\dots\dots(10)$$

となる。式(10)において τ_0 をすべり系の臨界せん断応力とみなすと、この式は結晶塑性の重要概念であるいわゆるSchmid則の等式表現そのものである。式(10)は、式(1)において $m=0$ と置くものであり、 $\operatorname{sgn}(\dot{\gamma}^{(k)})$ を Fig. 1に示される一般化された関数と考えることで、 $m=0$ の場合がひずみ速度非依存型に対応することが厳密な形で証明される。

以上から、従来のひずみ速度依存型結晶塑性理論は、一般化されたBishop-Hill理論を表す最適化問題の制約式部分のみを取り出した簡便理論で、厳密には式(7)または式(9)のような非線形最適化問題として定義されるべきものといえる。ただし、 $p=2$ (または $m=1$) のときのみ、制約式はすべて線形となり従来のひずみ速度依存型結晶塑性理論の解は式(7)または式(9)の問題のそれと一致する。また、式(6)の最適化問題では、 $p=1$ 以外の条件下において一般的に目的関数は非線形となり、いわゆる線形計画問題における“退化”，すなわち解の唯一性欠如現象^{5,7)}は生じない。

4. 一般化 Taylor理論による Relaxed Constraintsモデルの定式化

結晶塑性に関するTaylor理論は Γ 空間、すなわちすべり速度 $\dot{\gamma}^{(k)}$ の組を要素とするバナッハ空間上で、ノルムを最小化する制約付き最適化問題として定式化でき、その双対問題を数理計画法の理論をもとに導出すると、そこにはいわゆるひずみ速度依存型結晶塑性モデルの基本式が含まれていることが判った。

一方、狭義のTaylor理論やひずみ速度依存型結晶塑性論が使われる多結晶体の変形集合組織の解析・予測問題においては、各結晶粒間でのひずみ (または速度勾配) の拘束条件と各粒間での力学的相互作用の取り扱いに関するモデル (grain-interaction modeling) として、二つの考え方がある^{3,5,12-14)}。一つは full constraint model (FCモデル)¹²⁾であり、他は relaxed constraints model (RCモデル)^{13,14)}である。“古典Taylorモデル”とも呼ばれるFCモデルでは、各結晶粒に指定される速度勾配成分 L_{ij} の全ては、多結晶体全体としての巨視的なそれ (L_{ij}) に一致すると考える。一方、RCモデルでは、変形後の結晶粒形状の変化に対応して、粒界近傍を除いた粒内領域では、変位の適合条件の一部が緩和され、そこでは指定されるべき速度勾配成分 L_{ij} のいくつかは全く free になると考える。すなわち、2の式(6)で示される最適化問題の独立な5箇の D_{ij} (速度勾配テンソル L_{ij} の対称成分) に関する制約式

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N (m_{ij}^{(k)} + m_{ji}^{(k)}) \dot{\gamma}^{(k)},$$

$$D_{ij} = 0 \dots\dots\dots(11)$$

のうち、緩和されるべき成分のいくつかは、引き抜かれたものとなる。この場合、5箇の独立な D_{ij} 成分のうち、たとえば D_{pq} 成分を緩和すると、それに対応して式(7)または式(9)で定義される最適化問題の双対問題、すなわちBishop-Hill問題では D_{pq} と同じ下添字のCauchy偏差応力 σ_{pq} はあらかじめ指定されたものとなるのが (通常は $\sigma_{pq} = 0$ を取ることが多い)、狭義の意味でのRCモデルである。

ここでは2で定義された一般化Taylor理論を用いて、多結晶塑性に関するRCモデルを、従来のRCモデルのもつ意味を拡張した形で定式化することを試みる。

いま、緩和される速度勾配成分は L_{pq} という一つの成分でなく、また、緩和されるべき単純せん断面とその方向は基準座標系に関してどのような傾きをもつものであってもよいと考える。そこで基準座標系に関して、単位法線ベクトルが $\mathbf{s}^{(s)}$ をもつ面で、かつ、せん断方向の単位ベクトルが $\mathbf{d}^{(s)}$ なる方向について変形が緩和されると考えよう。このとき $\mathbf{g}^{(s)} = \mathbf{d}^{(s)} \otimes \mathbf{s}^{(s)}$ と定義して、変形拘束が緩められることによって生ずるせん断速度を $\dot{\gamma}_p^{(s)}$ と書く。ただし、独立な緩和すべりの種類 (すなわち、 s の箇数、それを M とする) は最大4箇までである。このように考えると、着目する結晶粒の内部領域に生ずる実際の塑性ストレッチング D_{ij} は以下のように与えられる。

$$D_{ij} = \langle D_{ij} \rangle + \sum_{s=1}^M \frac{1}{2} (g_{ij}^{(s)} + g_{ji}^{(s)}) \dot{\gamma}_p^{(s)} \dots\dots\dots(12)$$

ここで、

$$\rho_{ij} = \sum_{s=1}^M \frac{1}{2} (g_{ij}^{(s)} + g_{ji}^{(s)}) \dot{\gamma}_p^{(s)} \dots\dots\dots(13)$$

とすれば、 $\rho_{ij}=D_{ij}-\langle D_{ij} \rangle$ となり、これはいわゆる“relaxation tensor¹⁵⁾”と呼ばれるものである。ただし、 $\langle D_{ij} \rangle$ は多結晶全体としての巨視的な塑性ストレッチングである。いま、仮想的に考えたせん断速度 $\dot{\gamma}_p^{(s)}$ についても、それらの重ね合せの特性は維持されるから、2と同様に $(N+M)$ 個の $\dot{\gamma}^{(k)}$ と $\dot{\gamma}_p^{(s)}$ の組を要素とする以下のベクトル空間 Γ_r を考えることができる。すなわち、

$$\Gamma_r = (\dot{\gamma}^{(1)}, \dot{\gamma}^{(2)}, \dot{\gamma}^{(3)}, \dots, \dot{\gamma}^{(N)}, \dot{\gamma}_p^{(1)}, \dots, \dot{\gamma}_p^{(M)}) \in V^{(N+M)} \dots\dots\dots (14)$$

また、その原点は

$$\Gamma_{r0} = (0, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \in V^{(N+M)} \dots\dots\dots (15)$$

である。ただし、 M は 0 以上でかつ 4 以下の整数である。式(14)と式(15)のように、ベクトル空間の構成要素中に変形拘束を一部緩和することによって生ずる仮想的なせん断速度 $\dot{\gamma}_p^{(s)}$ を含めることは、 $\dot{\gamma}_p^{(s)}$ もすべり系のすべり速度 $\dot{\gamma}^{(k)}$ と同様に独立な内部状態変数とみなすことを意味する。すなわち、一部の变形拘束条件をすべて free にしてしまう狭義の RC モデルでは、free にした D_{pq} 成分に対応する Cauchy 応力 σ_{pq} を指定するという立場を取るが、ここでは変形拘束の緩和を新しい内部状態変数の導入という形で表現するので、Cauchy 応力 σ_{ij} の成分はすべて指定されない。

有限次元のベクトル空間 $V^{(N+M)}$ の要素に対し、2と同様に次のような p -norm を定義する。

$$\|\Gamma_r\|_p = \left(\sum_{k=1}^N |\dot{\gamma}^{(k)}|^p + \sum_{s=1}^M |\dot{\gamma}_p^{(s)}|^p \right)^{1/p} \dots\dots\dots (16)$$

ただし、実数 p は $1 \leq p < \infty$ である。したがって、いわゆる RC モデルに対する一般化 Taylor 問題は以下のような有限次元バナッハ空間 Γ_r 上の制約付きノルム最小化問題として定義できる。

$$E_T(\Gamma_r) = \tau_0 \left(\sum_{k=1}^N |\dot{\gamma}^{(k)}|^p + \sum_{s=1}^M |\dot{\gamma}_p^{(s)}|^p \right)^{1/p} \rightarrow \text{minimize}$$

subject to

$$\langle D_{ij} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N (m_{ij}^{(k)} + m_{ji}^{(k)}) \dot{\gamma}^{(k)} - \frac{1}{2} \sum_{s=1}^M (g_{ij}^{(s)} + g_{ji}^{(s)}) \dot{\gamma}_p^{(s)} \dots\dots\dots (17)$$

以上で定式化されたものは、いわば一般化 relaxed Taylor 理論と呼ばれるべきものであるが、通常の狭義の意味での relaxed constraints モデルに関する理論とは異なる。すなわち、式(17)で示される理論の定式化では、変形拘束を一部緩和することによって生じる隣接粒との間の strain rate misfit ρ_{ij} を粒界近傍で解消するために必要な仕事の散逸項を考慮していることである。一方、従来の意味での RC モデルでは、 ρ_{ij} を解消するための内部仕事率項を全く無視する。

式(17)の左辺の τ_0 は各すべり系上での転位のすべり運動

に対する粘性抵抗と解釈されるが⁴⁾、緩和項 $\dot{\gamma}_p^{(s)}$ は仮想的に導入した擬似的なすべり(pseudo-slip)であるので、それに対する粘性抵抗は現実のすべり系に対する τ_0 とは異なるものと解釈する方が妥当である。そこで、擬似すべり系に対する変形抵抗を新たに τ_p とし、その τ_0 に対する比を $(\tau_p/\tau_0) = \alpha$ と置くと、式(17)の一般化 RC モデル問題は以下のような制約付き最適化問題として定式化し直される。

$$E_T(\dot{\gamma}^{(k)}, \dot{\gamma}_p^{(s)}) = \tau_0 \left(\sum_{k=1}^N |\dot{\gamma}^{(k)}|^p + \sum_{s=1}^M |\alpha \dot{\gamma}_p^{(s)}|^p \right)^{1/p} \rightarrow \text{minimize}$$

subject to

$$\langle D_{ij} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N (m_{ij}^{(k)} + m_{ji}^{(k)}) \dot{\gamma}^{(k)} - \frac{1}{2} \sum_{s=1}^M (g_{ij}^{(s)} + g_{ji}^{(s)}) \dot{\gamma}_p^{(s)} \dots\dots\dots (18)$$

上式で定義された最適化問題の目的関数右辺の括弧内の第2項は、結晶粒の内部領域において拘束が緩和されたことによって発生するひずみの misfit を粒界近傍で解消するために要するエネルギー散逸項に対応するものである。 τ_p は注目する粒に対する隣接粒による一種の塑性拘束の大きさを規定するもので、 α はいわゆる“塑性拘束係数”に対応するものとなる。すなわち、 α を 0 にすれば、塑性拘束が全くない狭義の RC モデルとなり、逆に α が十分大きければ、これは FC モデルに漸近する。

さて3で扱ったと同様に式(18)で示される問題を主問題とし、双対性定理を使ってその双対問題、いわゆる一般化 Bishop-Hill 理論、を導出すれば以下のようになる。

$$E_{BH}(\sigma_{ij}) = \langle D_{ij} \rangle \sigma_{ij} \rightarrow \text{maximize}$$

subject to

$$\frac{1}{2} (m_{ij}^{(k)} + m_{ji}^{(k)}) \sigma_{ij} = (\tau_0 / A') \text{sgn}(\dot{\gamma}^{(k)}) |\dot{\gamma}^{(k)}|^{p-1},$$

$$\frac{1}{2} (g_{ij}^{(s)} + g_{ji}^{(s)}) \sigma_{ij} = (\tau_0 / A') \alpha \text{sgn}(\dot{\gamma}_p^{(s)}) |\dot{\gamma}_p^{(s)}|^{p-1}$$

and

$$\langle D_{ij} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N (m_{ij}^{(k)} + m_{ji}^{(k)}) \dot{\gamma}^{(k)} - \frac{1}{2} \sum_{s=1}^M (g_{ij}^{(s)} + g_{ji}^{(s)}) \dot{\gamma}_p^{(s)} \dots\dots\dots (19)$$

上式で示される最適化問題の制約式群について、定数項 A' を $A' = (\dot{\gamma}_0)^{p-1}$ 、ならびに p を $p = m+1$ と置くと、これらは以下のようにまとめられる。

$$\langle D_{ij} \rangle = \frac{\dot{\gamma}_0}{2\tau_0^{1/m}} \left[\sum_{k=1}^N (m_{ij}^{(k)} + m_{ji}^{(k)}) m_{kl}^{(k)} \sigma_{kl} |m_{mn}^{(k)} \sigma_{mn}|^{1/m-1} - \frac{1}{\alpha^{1/m}} \sum_{s=1}^M (g_{ij}^{(s)} + g_{ji}^{(s)}) g_{kl}^{(s)} \sigma_{kl} |g_{mn}^{(s)} \sigma_{mn}|^{1/m-1} \right] \dots\dots\dots (20)$$

以上から、式(19)の問題における制約式群は式(20)のような σ_{ij} に関する一組の連立方程式としてまとめ上げられ

る。式(20)の連立方程式は $m=0$ を除き、 $p=2$ すなわち $m=1$ 以外は非線型連立方程式となり、一般的に解は一つではない。したがって、結晶体を実現する応力状態 (Bishop-Hill 応力状態) は式(20)の非線型連立方程式のいくつかの実解 (σ_{ij}^0) のうち、 $(D_{ij})\sigma_{ij}^0$ を最大にするものになる。通常のひずみ速度依存型塑性論では、簡便的に式(20)のような非線型連立方程式のいくつかの実解における任意の一つを最適解とみなすが、厳密には本論文で示されたごとく式(19)のように、 σ_{ij} に関する非線型連立方程式を制約式とする最適化問題とみなすべきである。ただし、 $m=1$ (または $p=2$) のときのみ、式(20)は σ_{ij} に関し線型連立方程式となり、その解は一組の σ_{ij}^0 となり、式(19)で示される問題は、最適化問題としての実質的な意味を失う。換言すれば、 $m=1$ ($p=2$) の場合に限って一般化 Taylor-Bishop-Hill 理論は従来のひずみ速度依存型結晶塑性論と完全に一致するものとなる。 $p=2$ の場合では、 Γ 空間または Γ_r 空間はユークリッド空間となる。最近、Anand と Kothari¹⁶⁾ はひずみ速度“非”依存型結晶塑性性に対して、活動すべり系のすべり速度を唯一に決定する手法としてロバスト計算法 (ユークリッドノルム最小化法) なる手法を提案している。この計算法は本論文で示された $p=2$ のケースと同等であり、彼らの提案する手法は実はひずみ速度感受性指数 m が $m=1$ の場合に対応するものとなっており、 m が 0 のときのひずみ速度“非依存型”に対応しておらず、この手法はひずみ速度“依存型”の特別なケースのみを対象にしたものといえる。

5. まとめ

結晶塑性に関する Taylor 理論は Γ 空間 (各すべり系のすべり速度 $\dot{\gamma}^k$ の組を要素とするバナッハ空間) において、ノルムを最小化する制約付き最適化問題として定式化でき、それは、いわゆる“ひずみ速度依存型結晶塑性モデル”を包括することが判った。さらに、一般化された Taylor-Bishop-Hill 理論をもとに、いわゆる多結晶塑性性に関する従来の relaxed constraints モデルを拡張した形で定式化を行い、ひずみ速度依存型結晶塑性モデルを含み、かつ full constraint モデルから relaxed constraints モデルまでの広範囲な条件を包括する一つの最適化問題として提示した。

本研究は日本鉄鋼協会の再結晶・集合組織研究会における共同研究の一部としてなされたものであり、費用の一部は同研究会の研究費によったことを付記し、謝意を表する。

付 録

変数を \mathbf{x} とする等式制約条件をもつ、次の最適化問題 (主問題) を考える。

$$f(\mathbf{x}) \rightarrow \text{minimize}$$

subject to

$$h_j(\mathbf{x})=0 \quad (j=1, 2, 3, \dots, N)$$

ここで、 $\mathbf{x}^T=(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ である。このとき、上記の問題に対する双対問題は以下のように定義される。

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{u})=f(\mathbf{x})+\sum_{j=1}^N u_j h_j(\mathbf{x}) \rightarrow \text{maximize}$$

subject to

$$\frac{\partial L(\mathbf{x}, \mathbf{u})}{\partial \mathbf{x}}=0, \quad h_j(\mathbf{x})=0 \quad (j=1, 2, 3, \dots, N)$$

ただし、 $\mathbf{u}^T=(u_1, u_2, u_3, \dots, u_N)$ はラグランジェ乗数である。

文 献

- 1) G.I.Taylor: *J. Inst. Met.*, **62** (1938), 307.
- 2) E.Aernoudt: Proc. 5th Int. Conf. Textures of Materials, vol.1, ed. by G.Gottstein and K.Lücke, Springer-Verlag, Berlin, (1978), 45.
- 3) Leffers, R.J.Asaro, J.H.Driver, U.F.Kocks, H.Mecking, C.Tomé and P.Van Houtte: Proc. 8th Int. Conf. Textures of Materials, ed. by J.S.Kallend and G.Gottstein, The Metallurgical Soc., Warrendale, (1988), 265.
- 4) R.J.Asaro and A.Needleman, *Acta Metall.*, **33** (1985), 923.
- 5) 関根和喜: 日本金属学会セミナー「多結晶体の結晶方位分布の制御と材料特性」テキスト, 日本金属学会, 仙台, (1992), 13.
- 6) G.R.Canova, C.Fressengeas, C.Molinari and U.F.Kocks: *Acta Metall.*, **36** (1988), 1961.
- 7) P.Van Houtte: *Textures Microstruct.*, **8** and **9** (1988), 313.
- 8) 宮寺 功: 関数解析, 理工学社, 東京, (1995), 8.
- 9) 一森哲男: 数理計画法, 共立出版, 東京, (1994), 84.
- 10) 藤田 宏: 岩波講座応用数学「関数解析」, 岩波書店, 東京, (1995), 38.
- 11) J.F.W.Bishop and R.Hill: *Philos. Mag.*, **42** (1951), 414; 1298.
- 12) U.F.Kocks: Texture and Anisotropy, ed. by U.F.Kocks, C.N.Tomé and H.-R.Wenk, Cambridge University Press, Cambridge, (1998), 390.
- 13) P.Van Houtte: *Mater. Sci. Eng.*, **55** (1982), 69.
- 14) U.F.Kocks and H.Chandra: *Acta Metall.*, **30** (1982), 695.
- 15) P.Van Houtte: Proc. 11th Int. Conf. Textures of Materials, vol. 1, ed. by Z.Liang, L.Luo and Y.Chu, Int. Academic Pub., Beijing, (1996), 236.
- 16) L.Anand and M.Kothari: *J. Mech. Phys. Solids*, **44** (1996), 525.