

塑性加工材の集合組織の予測と評価手法の開発

横浜国立大学 工学部 物質工学科

助教授 関根和喜

(平成5年度研究開発助成 AF-93029)

1. 研究の背景と目的

塑性加工によって製造された金属材料の諸性質には集合組織に基づく強い異方性が存在し、これは使用上の問題点ともなるが、むしろ積極的に利用すれば、品質の向上につながる。そこで、集合組織の制御と有効利用のためには、塑性加工中の変形過程に対応して発達する結晶集合組織を簡便かつ定量的に予測する技術が必要となる。

大変形によって形成される金属の変形集合組織の予測モデルに関し、いくつかの基本的モデル^{(1),(2)}が提出されているが、その中でTaylorモデルによる予測法が簡便かつ実用的なものと考えられている⁽²⁾。このモデルによる解析法の基礎をなす理論は、最大外部塑性仕事の原理に基づくBishop-Hill理論⁽³⁾と、最小せん断和の原理に基づくTaylor理論⁽⁴⁾である。これら2つの理論は、数理計画法の双対問題に相当し、両者は等価の関係にあることがすでに数学的に証明されている^{(5),(6)}。大変形を受けた多結晶体の変形集合組織形成の予測手法としてのTaylorモデルには、各結晶粒間での変位の拘束条件と各粒間での力学的相互作用の取扱い方 (grain-interaction modelling) に関し、2つの考え方があり、その1つはfull constraint model (FCモデル、又は古典Taylorモデルとも呼ばれる。) で、もう1つはrelaxed constraints model (RCモデル、又は緩和Taylorモデルとも呼ばれる。) である。

多結晶塑性に関するFCモデルでは、各結晶粒の変形が多結晶全体としてのそれに完全に一致することを仮定する。したがって、結晶体各点の速度勾配成分 L_{ij} 又は物質ストレッチ成分 D_{ij} はすべて指定されることになる。それに対し、 L_{ij} (又は D_{ij}) 成分のいくつかを全くfreeにして解析するのが緩和Taylorモデル (RCモデル) であるが、各結晶粒の応力状態 (Bishop-Hill応力状態) には無関係に、 L_{ij} のいくつかを全くfreeにすることには問題がある。それは材料全体としての巨視的な速度勾配成分 $\langle L_{ij} \rangle$ (又は $\langle D_{ij} \rangle$) が、ほぼ全て一定なものとして決まっているのに、各結晶粒に生ずる L_{ij} のいくつかを“全くfree”にしてしまうという点にある。 L_{ij} (又は D_{ij}) のいくつかを完全にfreeにするのではなく、むしろこれを制約の緩いfuzzy集合と考える方がよい。

本研究では、変形集合組織の予測に関するより合理的な

手法の確立を目指し、このようなfuzzy理論に基づく“Fuzzy-Taylorモデル”というべきものを提案し、これをfuzzy計画法の問題として定式化する。さらに、定式化したアルゴリズムに基づき、任意の大変形を受ける多結晶の変形集合組織を予測するためのコンピュータプログラムを開発する。そして、プログラムの有効性を確認するため、すべり変形するbcc多結晶金属の圧延集合組織をシミュレートし、その結果と実測データとを対比して、モデルの妥当性を検証する。

2. ファジィ理論によるTaylorモデルの定式化

結晶塑性に関するTaylor-Bishop-Hill理論⁽³⁾は、一般的には制約付きの最適化問題として定式化される。すなわち、各結晶粒の現在配置 (current configuration) におけるk番目のすべり系のSchmid因子テンソルを $m_{ij}^{(k)}$ ($=b_i^{(k)}n_j^{(k)}$ 、ただし $b_i^{(k)}n_j^{(k)}$ はそれぞれ、すべり方向とすべり面法線方向の単位ベクトル)、その臨界せん断応力を $\tau_c^{(k)}$ 、そして結晶体各点での物質ストレッチ成分 D_{ij} を既知とすると、Cauchy偏差応力 σ_{ij} 、あるいはすべり系上でのすべり速度 $\dot{\gamma}^{(k)}$ を変数とし、外部塑性仕事率または内部仕事率をそれぞれ最大化 (Bishop-Hill問題) 又は最小化 (Taylor問題) する問題となる。例えば、最小化問題 (Taylor問題) は以下のようになる。

目的関数

$$\dot{\epsilon}_T(\dot{\gamma}^{(k)}) = \sum_{k=1}^n \tau_c^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)} \rightarrow \min \quad (1)$$

制約式

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

$$\dot{\gamma}^{(k)} \geq 0 \quad (k=1, 2, 3, \dots, N) \quad (3)$$

上記の最小化問題において、各結晶粒に指定される D_{ij} の全ての成分に対し、多結晶全体としての巨視的な物質ストレッチ $\langle D_{ij} \rangle$ にこれらが等しいと置くのが、“FCモデル”である。一方、 D_{ij} のいくつかをfreeにし、たとえば式(2)の制約式群から対応する制約式を除き、かつfreeにした D_{pq} 成分と同じ添字をもつ応力成分 σ_{pq} を指定して、解析するのが“RCモデル”である。

本研究では、結晶に指定されるべき D_{ij} をクリスプな既知数とみるのではなく、かつ、その一部を全くfreeにするでもなく、各結晶粒に実現される D_{ij} は“大体 $\langle D_{ij} \rangle$ になっている”という曖昧性を含んだ、いわゆるfuzzy数であると解釈することにする。このように考えると、各 D_{ij} 成分には帰属度を意味する、いわゆるmembership関数が割り付けられることになる。membership関数とは、区間 $[0, 1]$ の値を取り、要素 x_{ij} がファジィ集合 D_{ij} に属する度合いを表す⁽⁷⁾。すなわち、多結晶体各点での独立の物質ストレッチ D_{ij} は、L型ファジィ数とし、そのmembership関数 $\mu_{D_{ij}}(x_{ij})$ をつぎのような、三角型関数として与えることを提案する。

$$\mu_{D_{ij}}(x_{ij}) = \max.(0, 1 - |x_{ij} - \langle D_{ij} \rangle| / a) \quad (a > 0) \quad (4)$$

式(4)で示される三角型のmembership関数を図1に示す。

図1に示されるように、式(4)中の定数 a はファジィ数 D_{ij} の拡がりや規定するパラメータであり、 $a \rightarrow \infty$ とすれば、要素 x_{ij} の全域でmembership値は1を取り、この場合RCモデルに一致する。一方、 a を十分小さくすると、 $x_{ij} = \langle D_{ij} \rangle$ のとき以外は $\mu_{D_{ij}}(x_{ij}) \approx 0$ となり、これはFCモデルに一致する。したがって、 a を適当に設定することで、FCモデルとRCモデルの中間のモデルを作り出すことが可能となる。これが本研究の主張点の1つである。さらに式(4)において、 $x_{ij} - \langle D_{ij} \rangle = \dot{\gamma}_{ij}^p$ なる変数変換を行えば、

$$\mu_{D_{ij}}(\dot{\gamma}_{ij}^p) = \max.(0, 1 - |\dot{\gamma}_{ij}^p| / a) \quad (a > 0) \quad (5)$$

なるmembership関数が定義される。これを図2に示す。

式(5)で示される $\dot{\gamma}_{ij}^p$ は、変形拘束条件に曖昧性を導入したために、各結晶粒において $\langle D_{ij} \rangle$ から偏奇して発生したひずみ速度成分で、いわゆる“strain rate misfit”を意

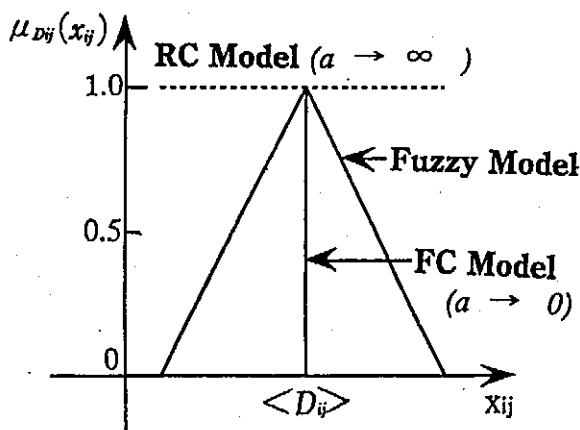


図1 ファジィ数 D_{ij} に対する三角型membership関数

味する。そして、これらは条件内で帰属度すなわちmembership関数ができるだけ大きくなるような形で実現すると考える。このように、各結晶粒に対して指定されるべき D_{ij} がファジィ数と考えられたことによって、式(1)~(3)で示される数理計画法の最小値問題は、次のように書きかえられる。

目的関数

$$\dot{E}_T(\dot{\gamma}^{(k)}) = \sum_{k=1}^N \tau_0^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)} \rightarrow \min. \quad (6)$$

制約式

$$\langle D_{ij} \rangle = \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} (m_{ij}^{(k)} + m_{ij}^{(k)}) \dot{\gamma}^{(k)} - \dot{\gamma}_{ij}^p \quad (7)$$

ただし、

$$\mu_{D_{ij}}(\dot{\gamma}_{ij}^p) = \max.(0, 1 - |\dot{\gamma}_{ij}^p| / a) \quad (a > 0) \quad (8)$$

上記で定義された問題は、式(7)中にファジィ数が含まれるという意味において通常の数理計画法の問題とは異なる。このような問題は、ファジィ計画法問題と呼ばれる⁽⁸⁾。したがって、ここで、式(6)~(8)で定義されたものを“ファジィ・Taylor問題”と呼ぼう。式(6)~(8)のファジィ・Taylor問題をみると、最適解は、 $\dot{\gamma}_{ij}^p$ がいかなる値をとるかによって変わってくる。当然ながら、 $\dot{\gamma}_{ij}^p = 0$ の場合の、すなわちFCモデルに対応する場合の、 \dot{E}_T の最小値 $\dot{E}_T, \min.(\dot{\gamma}_{ij}^p = 0)$ よりも $\dot{\gamma}_{ij}^p \neq 0$ における最小値 $\dot{E}_T, \min.(\dot{\gamma}_{ij}^p \neq 0)$ の方がさらに小さい場合もあり得ることを示している。 $\dot{E}_T, \min.(\dot{\gamma}_{ij}^p \neq 0) < \dot{E}_T, \min.(\dot{\gamma}_{ij}^p = 0)$ なる条件下では、 $\mu_{D_{ij}}(\dot{\gamma}_{ij}^p)$ は1より小さくなり、 D_{ij} の帰属度は低下する。このことを数理計画法の問題として言い換えると、式(7)の制約条件を満たしながら、 $\dot{E}_T(\dot{\gamma}^{(k)})$ をでき

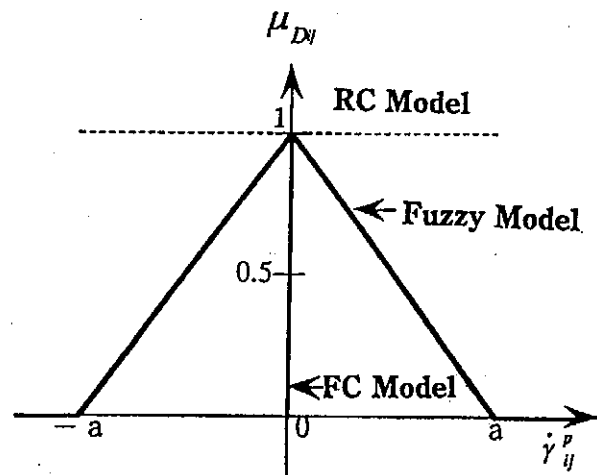


図2 ファジィ要素 $\dot{\gamma}_{ij}^p$ に関する三角型membership関数

るだけ小さく、かつ帰属度すなわち membership 値 $\mu_{D_{ij}}(\dot{\gamma}_{ij}^p)$ をできるだけ大きくするように現象が実現する、と考えることと等価である。

すなわち、式 (6) と (7) で示される単一目的関数を有するファジィ計画法問題を拡張し、これに membership 値 $\mu_{D_{ij}}(\dot{\gamma}_{ij}^p)$ を最大、言い換えれば、 $-\mu_{D_{ij}}(\dot{\gamma}_{ij}^p)$ を最小にする条件が追加されることになる。したがって、ファジィ・Taylor問題は、つぎのような多目的計画法の問題として書き直せる。

目的関数群

$$\dot{\epsilon}_T(\dot{\gamma}^{(k)}) = \sum_{i=1}^N \tau_i^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)} \rightarrow \min \quad (9)$$

$$-\mu_{D_{ij}}(\dot{\gamma}_{ij}^p) \rightarrow \min \quad (10)$$

制約式

$$\langle D_{ij} \rangle = \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} (m_i^{(k)} + m_j^{(k)}) \dot{\gamma}^{(k)} - \dot{\gamma}_{ij}^p \quad (11)$$

$$\dot{\gamma}^{(k)} \geq 0 \quad (k=1, 2, 3, \dots, N) \quad (12)$$

以上が Taylor理論に、変形拘束に関するファジィ制約条件を導入した場合の定式化の結果である。

3. ファジィ・Taylor問題の解法と結晶回転の追跡法

前節の式 (9) ~ (12) において、多目的計画法として定式化された、いわゆるファジィ・Taylor問題を解くことによって、変形集合組織発達予測が可能となる。すなわち、式 (9) ~ (12) の問題において、 $\langle D_{ij} \rangle$ ならびに $\tau_i^{(k)}$ を既知数として与え、さらにファジィ数として定義された、 D_{ij} のいくつかの成分に対する membership 関数について、これを規定するパラメータ a を定めれば、この問題を解くことができる。

多目的計画法の最適解はパレート解 (Pareto solution)⁽⁹⁾ と呼ばれ、これを求めるには、普通、目的関数群の単一化による“スカラー化手法”がよく用いられる。スカラー化手法とは、各目的関数にいわゆるウェイト (重み) を付与して単一目的関数化するものである⁽⁹⁾。本報でも、スカラー化手法によって解を求めることとした。設定したパラメータ a に対し、パレート最適解、 $\dot{\gamma}^{0(k)}$ および、 $\dot{\gamma}_{ij}^{op}$ から各すべり系のすべり速度量が決定されれば、次式

$$\Omega_{ij} = \langle W_{ij} \rangle = \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} (m_i^{(k)} - m_j^{(k)}) \dot{\gamma}^{0(k)} + \dot{\gamma}_{ij}^p \quad (13)$$

から格子スピン Ω_{ij} が計算でき、これより各変形段階での格

子回転が追跡できることになる。ただし、式 (13) での $\langle W_{ij} \rangle$ は全物質スピンと呼ばれ、結晶全体に課せられた巨視的な速度勾配 $\langle L_{ij} \rangle$ の反対称成分を意味する。格子スピンから、変形中の格子回転 (方位回転) を計算する場合には、有限回転に基づく計算法が必要となる。これについては、著者らによって提案された厳密な計算方法⁽¹⁰⁾を採用した。

4. bcc 金属の圧延集合組織のシミュレーション

本報で提案された、ファジィ・Taylorモデルの妥当性を検証するため、 α -Feなどを中心とする bcc 金属多結晶体の圧延集合組織をシミュレートすることにした。

α -Fe多結晶体において高圧下率で発達する圧延集合組織を構成する方位成分に関しては、古くから多くの研究がなされている。近年になって、結晶方位分布の三次元解析法を利用した詳しい研究がなされるようになり^{(11),(12)}、主として圧延方向に $\langle 110 \rangle$ が配列した繊維組織 (R. D. // $\langle 110 \rangle$ fiber texture 又は α -fiber texture) と圧延面に $\{111\}$ 面が平行に配列した、いわゆる R. P. N. // $\langle 111 \rangle$ fiber texture (γ -fiber texture) の、2つの繊維組織で構成されていることがわかってきた。後者は、いわゆる $\langle 110 \rangle$ 軸が R.D. から 60° 傾いた繊維組織、すなわち “R. D. - 60° $\langle 110 \rangle$ fiber texture” に極めて近いものである。

一方、bcc 金属の圧延集合組織形成に関するシミュレーションも多くなされてきている^{(13),(14)}。しかし、一般的に言って、それらは実測のものを完全に説明するものではない。例えば、FCモデルを採用すると、R. D. - 60° $\langle 110 \rangle$ fiber textureのみを予測する。また、圧延を平面歪圧縮とし、板面に平行で互いに直交する2つの shear 成分を free にするいわゆる pancakeモデルを用いると、それは R. D. // $\langle 110 \rangle$ fiber (α -fiber) を多く含むような圧延集合組織となる。いままでの bcc 金属の圧延集合組織の理論的研究において、実測の結果に認められる R. P. N. // $\langle 111 \rangle$ 繊維組織を相当量含むような集合組織を予測した例はなかった。そこで、ファジィ・Taylorモデルを用いて、bcc 金属の圧延集合組織を予測することを試みた。

本シミュレーションにおいても、圧延変形を平面歪圧縮を基本とする変形様式とみなすが、図3で示されるように、各結晶粒の速度勾配成分 $\langle L_{ij} \rangle$ のうち、圧延面に平行なせん断速度成分のみを fuzzy 数とする。但し、圧延面に平行なせん断速度成分 L_{13} と L_{23} とを、独立に fuzzy 数として与えるのではなく、図3に添えられているごとく、

$$(L_{13})^2 + (L_{23})^2 = (L^{(p)})^2 \quad (14)$$

となるような二次形式で規定される fuzzy 数 $L^{(p)}$ を導入する。この意味は、圧延面上での任意方向のせん断速度を全

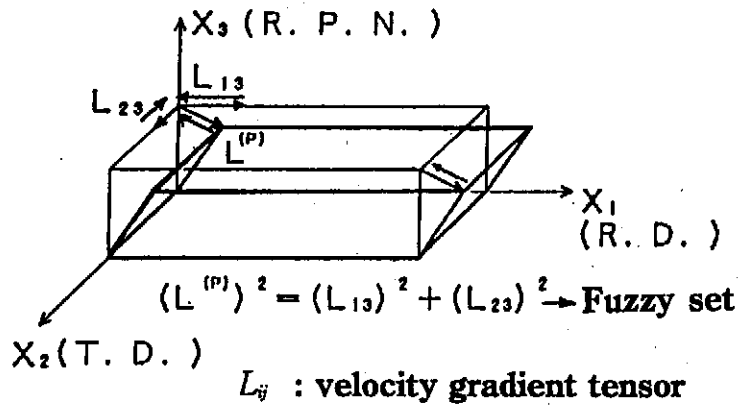


図3 圧延変形（平面ひずみ圧縮変形）に関する修正 pancake モデル

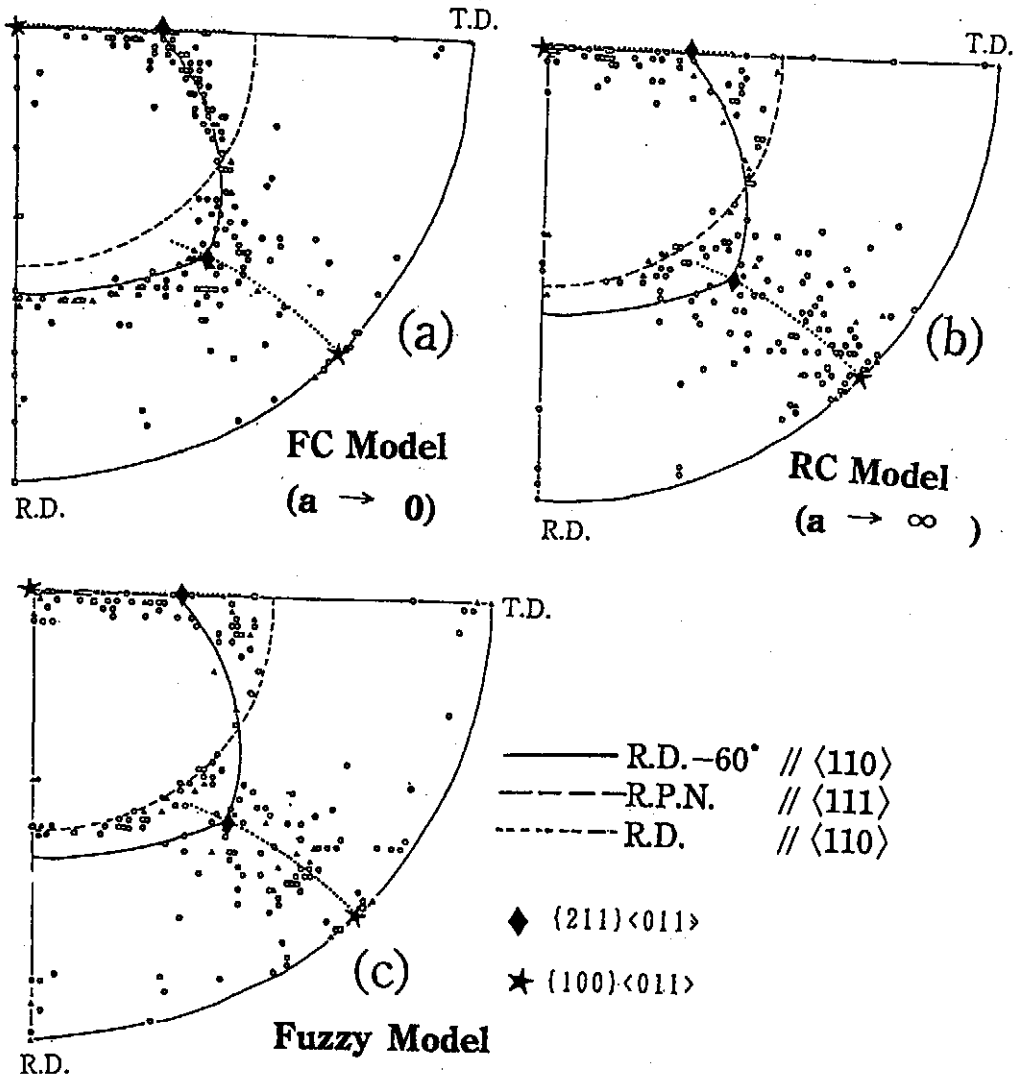


図4 各種モデルによって予測されたbcc金属の圧延集合組織の{100}極点図。圧下率80%の場合。
(a) FCモデル, (b) RCモデル, (c) Fuzzyモデル

てfuzzy数と考えることに相当する。これを、“修正 pancakeモデル”と呼ぶ。このとき、fuzzy数の拡がりの規定するパラメータ a を $(1/(\ar_c^{(k)}))$ なる形で与え、計算を行った。すべり系としては、 $\langle 111 \rangle$ ペンシルすべりを採用し、ランダム集合組織をはじめに与え、各圧下率での圧延集合組織を計算した。その結果の一例を図4に示す。図4の各{100}極点図は圧下率80%のものである。図(a)はFCモデル $(1/a \gg \tau_c^{(k)})$ に対応するもので、他の研究

用し、ランダム集合組織をはじめに与え、各圧下率での圧延集合組織を計算した。その結果の一例を図4に示す。図4の各{100}極点図は圧下率80%のものである。図(a)はFCモデル $(1/a \gg \tau_c^{(k)})$ に対応するもので、他の研究

者⁽¹³⁾と同様に R. D. $-60^\circ // \langle 110 \rangle$ fiber texture を予測している。図 (b) は $(1/\alpha \ll \tau_c^{(k)})$ なる条件下で得られたもので、いわゆる RC モデルに対応し、これでは強い α -fiber texture が発達している。一方、図 (C) は FC モデルと RC モデルの中間的な条件下 ($1/(\alpha \tau_c^{(k)}) \approx 0.32$)、すなわち ファジィ・モデルによるもので、 α -fiber texture とともに部分的 $\langle 111 \rangle //$ R. P. N. 繊維組織 (γ -fiber texture) の形成が認められ、実測の極点図に近いそれが得られることが判明した。

5. 結論

多結晶体の塑性変形モデルとして、各結晶粒に指定されるべき物質ストレッチ成分 D_{ij} (ひずみ速度成分) は固定されたクリスプな数としてみるのではなく、かつそのいくつかを全く free にしてしまうのでもなく、それらは材料全体としての巨視的なストレッチ成分 (D_{ij}) に“大体等しくなっている”と考えた。すなわち、各結晶粒に指定される D_{ij} は制約の緩い fuzzy 数と解釈し、結晶塑性に関する Taylor モデルに fuzzy 制約の概念を導入した。その結果として、多結晶塑性に関して、いわゆる ファジィ・Taylor モデルというべきものを提案した。そして、これを fuzzy 計画法の問題として定式化することに成功した。さらに定式化したアルゴリズムに基づき、大変形を受けた後に発達する多結晶体の変形集合組織を予測するための計算機プログラムを開発し、これを、bcc 金属の圧延集合組織のシミュレーションに適用した。シミュレーションの結果から、モデルの妥当性を検証できた。

最後に、本研究の遂行において、日本石油化学(株)樹脂研究所・石田大氏と大学院学生・王 軍および鄭 京煥の両君に多方面にわたり御協力をいただいた。付記して謝意を表したい。

参考文献

- (1) 関根和喜：日本金属学会セミナー「多結晶の結晶方位分布の制御と材料特性」テキスト、(1992)、p. 13.
- (2) P. Van Houtte：Proc. ICOTOM 7, Ed. by C. M. Brakman, P. Jongenburger and E. J. Mittemeijer, Netherlands Society for Materials Science, (1984), p. 7.
- (3) J. F. W. Bishop and R. Hill：Phil. Mag., Ser. 7, 42 (1951), p. 414 and p. 1298.

- (4) G. I. Taylor：J. Inst. Metals, 62 (1938), p. 307.
- (5) 大久保忠恒：塑性と加工、9 (1968), p. 681.
- (6) G. Y. Chin and W. L. Mammel：Trans. Met. Soc. AIME, 245 (1969), p. 1211.
- (7) 田中英夫：ファジィモデリングとその応用、朝倉書店、(1993)、p. 14.
- (8) たとえば、坂和正敏：ファジィ理論の基礎と応用、森北出版社、(1990)、P. 106.
- (9) 石倉 久、石川真澄：社会システム工学、朝倉書店、(1992)、p. 112.
- (10) 関根和喜、鄭 京煥：日本金属学会誌、59 (1995)、p. 356.
- (11) H. Inagaki：Z. Metallkde, Bd. 78 (1987)、p. 431.
- (12) L. Seidal, M. Holscher and K. Lucke：Textures and Microstruct., 11 (1989)、p. 171.
- (13) J. L. Raphanel and P. Van Houtte：Acta Metall., 33 (1985)、p. 1481.
- (14) L. S. Toth, J. J. Jonas, D. Daniel and R. K. Ray：Met. Trans. 21A (1990)、p. 2985.

発表論文

- (1) T. Ishida, Y. Kimura and K. Sekine：Crystallographic Texture Changes of Ethylene-Vinylalcohol Copolymer Films on Rolling, Materials Science Forum, Vol. 157-161 (1994)、p. 727.
- (2) 関根和喜、鄭 京煥：すべり変形による結晶回転場の発展方程式、日本金属学会誌、59 (1995)、p. 356.
- (3) K. Sekine and J. Wang：Fuzzy Modelling for Polycrystal Plasticity and Its Application to Simulating the Deformation Texture Evolution, Proc. 5th Int. Symp. on Plasticity and Its Current Applications, Ed. by S. Tanimura and A. Khan, Gordon and Breach Publishers, (1995)、p. 313.
- (4) 王 軍、鄭 京煥、関根和喜：速度依存型結晶塑性論のファジィ・モデリングによる定式化、日本金属学会第3回「集合組織と材料特性研究会」資料、(1995)、京都市、p. 23.