

EBSD-FEM データ変換インターフェースの構築と
それを用いたイメージベース結晶塑性解析河野 義樹^{*1}, 大橋 鉄也^{*2}, 眞山 剛^{*3}, 田中 将己^{*4}
坂本 盛敬^{*5}, 奥山 彫夢^{*4}, 佐藤 満弘^{*1}Development of a EBSD-FEM data conversion interface and
the image-based crystal plasticity analysisYoshiki KAWANO^{*1}, Tetsuya OHASHI^{*2}, Tsuyoshi MAYAMA^{*3}, Masaki TANAKA^{*4},
Morihiro SAKAMOTO^{*5}, Yelm OKUYAMA^{*4} and Michihiro SATO^{*1}^{*1,*2} Department of Mechanical Engineering, Kitami Institute of Technology
165 Koencho, Kitami-shi, Hokkaido 090-8507, Japan^{*3} Priority Organization for Innovation and Excellence Department of Materials Science and Engineering, Magnesium Research Center, Kumamoto University
2-39-1 Kurokami, Chuo-ku, Kumamoto 860-8555, Japan^{*4,*5} Department of Materials Science and Engineering, Kyushu University
744 Nishi-ku Motooka, Fukuoka 819-0395, Japan

Received: XXXX; Revised: XXXX; Accepted: XXXX

Abstract

Image-based deformation simulation of microstructures in metals is attracting attention; however, the data conversion processes from the images of microstructures into the geometric models for the deformation simulation are now inconvenient, and there is a possibility that it prevents diffusion of the image-based simulation. In order to solve the problem, we developed an interface to convert the data of crystal orientation maps obtained by Electron Back-Scatter Diffraction (EBSD) patterns into that of geometric models for Crystal Plasticity Finite Element (CPFE) analysis. The interface incorporates several functions for data cleaning and coarse graining of the microstructures: functions to narrow down the limits of Eulerian angles presenting crystal orientations, integrate crystal grains with similar crystal orientations, eliminate small crystal grains, select representative crystal orientation in each crystal grain, and so on. The interface was applied to an orientation map of polycrystal microstructure in pure titanium, and the coarse-grained geometric models were successfully obtained. Image-based CPFE analysis was conducted using the geometric models with different number of finite elements. The numbers of crystal grains were assumed to be around 50 in any geometric models. A dislocation density dependent constitutive equation was employed and uniaxial tensile loading was applied to the geometric models by the forced displacement. The results showed that spatial distributions of stress, strain, and dislocation density were good agreement among geometric models with different number of elements in both elastic and plastic ranges while values of the strain and dislocation density showed quantitatively dependency of the number of elements on their distributions in the plastic ranges. These features indicate that the qualitatively similar results can be obtained using the developed interface on the condition that coarse graining of the microstructures does not occur even though the number of elements is changed.

Keywords : Image-based simulation, Crystal plasticity analysis, EBSD, Data conversion, Coarse graining, Crystal orientation maps, Finite element method

No.17-00559 [DOI: 10.1299/transjsme.17-00559]

^{*1} 正員, 北見工業大学 (〒090-8507 北海道北見市公園町 165)^{*2} 正員, フェロー, 北見工業大学^{*3} 正員, 熊本大学大学院先進機構 (〒860-8555 熊本県熊本市中央区黒髪 2-39-1)^{*4} 正員, 九州大学材料工学部門 (〒819-0395 福岡県福岡市西区本岡 744)^{*5} 九州大学工学府物質プロセス工学専攻

E-mail of corresponding author: kawano_y@mail.kimami-it.ac.jp

[DOI: 10.1299/transjsme.1x-00000]

© 201x The Japan Society of Mechanical Engineers

1. 緒 言

計算機性能の飛躍的な向上と、Electron Back-Scatter Diffraction (EBSD) 等を用いた結晶方位マップ作成技術の向上は、金属微視組織のイメージデータを直接用いた結晶粒レベルでの変形解析を可能とした。例えば、Raabe et al. (2001) は、EBSD 法を用いて純 Al の結晶方位マップを作成し、それを要素分割して 2 次元の幾何モデルとし、結晶塑性有限要素 (Crystal Plasticity Finite Element : CPFE) 解析を実施した。Lewis and Gelmacher (2006) は、試験片の研削と結晶方位マップの作成を繰り返し、それらをつなぎ合わせる Serial sectioning 法と呼ばれる手法を用いて 3 次元結晶方位マップを作成し (Lewis et al., 2006), それを有限要素モデルに変換して変形解析を実施した。近年では、EBSD 法と X 線回折を用いた手法を組み合わせ (Zhang et al., 2015, Ghosh et al., 2016), 試験片を消失することなしに金属材料の 3 次元結晶方位マップを作成することが可能となってきた。近年、電子線リソグラフィを援用した微細格子マーカー法 (Morikawa et al., 2010), デジタル画像相関法 (Pan et al., 2009) や、EBSD 法によって変形前後の結晶方位変化からひずみを見積もる手法 (Wilkinson, 2001) 等、微視組織の変形解析評価手法が発達している。これらの実験的手法によって得られた結果は、イメージベースの微視組織の変形解析結果との比較が容易である。また、金属微視組織の変形解析において、結晶粒の形状等の幾何情報は、構成式の細かいパラメータ調整よりも影響が大きいとの指摘 (Zhang et al., 2015) がある。したがって、イメージベースの金属微視組織の変形解析は、今後更に重要性が増すと思われる。しかしながら、イメージデータを有限要素法 (Finite Element Method: FEM) 用の幾何モデルへ変換する作業は煩雑であり、それが普及の障害の一つとなっていると考えられる。

結晶方位の測定手法としては X 線を用いた手法や、マイクロファセットピット法等様々な方法があるが、その中でも EBSD 法は、測定時間が短く、位置情報の取得が可能であり、方位解析精度が高く、装置の導入が比較的容易という特徴を兼ね備えているため、結晶方位マップ作成のために広く使用されている (辻, 2008)。一方、金属微視組織の変形解析手法として、結晶塑性解析がよく用いられる。結晶塑性解析は、連続体力学の枠組みに転位や結晶方位等を含む微視組織の情報を取り込んだ解析手法である。金属材料の微視組織の変形機構の調査において、各結晶粒の結晶方位およびその空間的配置と、それらに依存したすべり系の活動を評価できることは極めて重要である。近年、結晶塑性解析の発展 (Roters, 2010) と普及は目覚ましく、現在では、結晶塑性解析は、研究者が独自に開発した CPFE 法のコードを用いて実施する他に、商用 FEM のユーザーサブルーチンを用いた解析 (例えば Mayeur and McDowell, 2007) や、オープンソースのコード (例えば Roters et al., 2012) を用いた解析が実施されている。

上記の様に、現在では、EBSD 法による結晶方位マップの作成環境と結晶塑性解析の実施環境は整えやすくなっており、これら 2 つを繋ぐインターフェースの開発は、単にイメージベース結晶塑性解析の効率化と普及に寄与するだけでなく、金属微視組織の力学に関する実験を主体とする研究者と数値解析を主体とする研究者を繋ぐツールとなり得る。本論文では、EBSD 法により取得した結晶方位マップデータから、CPFE 解析用幾何モデルを作製するインターフェースの開発を行ったので報告する。まず、同インターフェースおよび本論文で用いた CPFE 解析手法について述べる。次に、最密六方 (hcp) 構造を有する純チタン試料の EBSD データに同インターフェースを適用して、幾何モデルの作製と、それを用いたイメージベース CPFE 解析を実施した結果を示す。

2. イメージベース結晶塑性解析の手法

開発したインターフェース (以下インターフェースとする) とその前後の関係を図 1 に示す。大まかな流れは次の (i) ~ (iii) の通りである。(i) EBSD 法により取得した結晶方位マップ (以下結晶方位マップとする) のデータを用意する。この際、測定装置に付属する商用 EBSD 解析ソフトウェアを用いて、結晶粒の識別やデータクリーニング等を行う。(ii) 次に、この結晶方位マップの有限要素分割を行い、CPFE 解析のための幾何モデルデータへ変換する。この際、要素数を変更できるだけでなく、類似な結晶方位を有する結晶粒の統合等、微視組織自体の粗視化も可能とする。(iii) 最後に、作製した幾何モデルを用いて、CPFE 解析を実施する。2・1 節では (ii) のインターフェースに用いたアルゴリズムについて説明し、2・2 節では、(iii) で用いた CPFE 解析手法について説明する。

2・1 データ変換インターフェース

開発したインターフェースの概要を図1(ii)に示す。インターフェースには六角形ピクセルから成る結晶方位マップに対応したアルゴリズムを実装した。インターフェースを用いてEBSDデータをCPFE用幾何モデルに変換する方法は次の通りである。まず、結晶方位マップデータのデータクリーニングを実施する。データクリーニングは、EBSD測定装置に付属の商用ソフトウェアでも可能である。しかしながら、インターフェースのみによって、より色々なデータに対応できる様に、データクリーニングのアルゴリズムをインターフェースに実装した。次に、結晶方位を表すEuler角を再計算する。これは、結晶格子の対称性を考えた場合、等価な結晶の面や方向を表す複数のEuler角が存在するためである。即ち、EBSD測定結果の示すEuler角の範囲を、結晶格子の対称性を考慮することにより絞ることが出来る。次に、EBSD結晶方位マップからFEM用幾何モデルとする領域を拔出し、有限要素（六面体要素）に分割する。この際、それぞれの要素には、結晶粒ごとにEBSDデータより取得した代表結晶方位および相の情報を与える。以上の過程を経て、CPFE解析用幾何モデルを得る。各アルゴリズムの詳細については、以下に述べる。

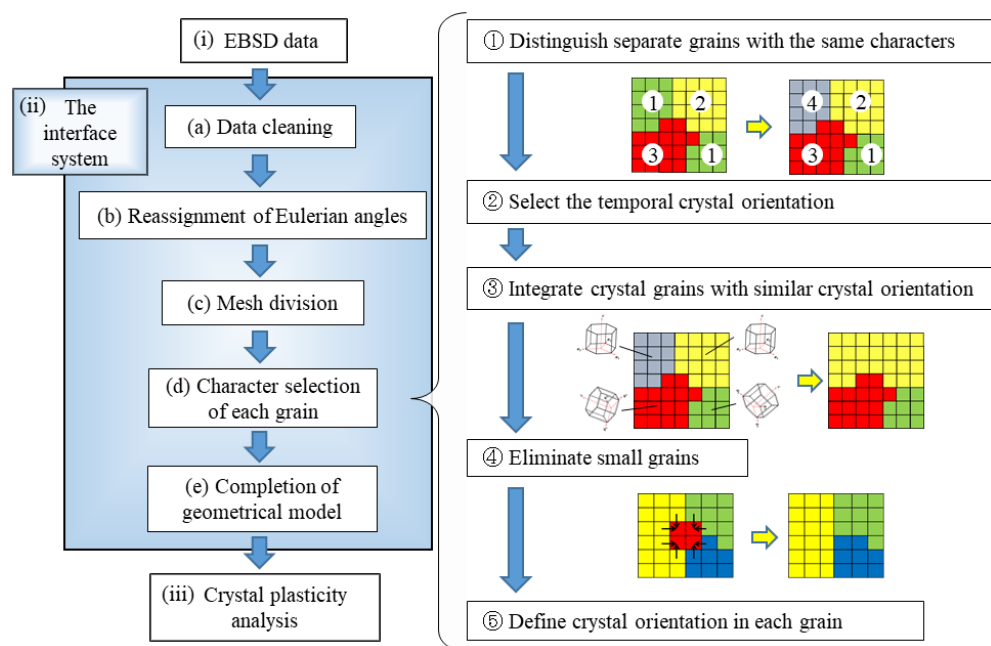


Fig. 1 Flow of interface system from EBSD data to crystal plasticity analysis.

2・1・1 信頼性指数を用いたデータクリーニング

EBSD測定装置に付属の商用解析ソフトウェアで出力可能なデータには、結晶方位を表す菊池パターンバンドの測定結果と理想のバンドとのずれを表すフィット指数、結晶性の良さを表すイメージオリテンター (IQ), 信頼性指数 (Confidential Index : CI) 等が存在する (鈴木, 2009)。このうち、結晶方位の指数付けの正確性を最も直接的に表しているのは CI であり、本論文で作製するインターフェースでは、CI を用いてデータクリーニングを実施する。CI は 0.0~1.0 の値を取り、菊池パターンから予想される複数の結晶方位の中から選ばれた結晶方

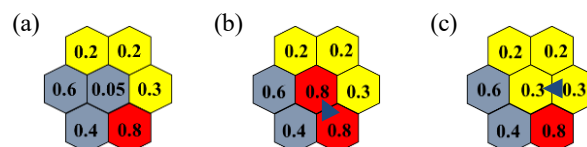


Fig. 2 Schematics showing methods of data cleaning. Initial state (a) and states after the data cleaning by the neighbor CI correlation (b) and modified CI correlation (c).

位の確からしさを表す。AI 多結晶試料では CI が 0.1 以上あれば、その結晶方位の正答率は 95%以上であるという報告がある（鈴木，2009）。

インターフェースに実装したデータクリーニング手法は Neighbor CI Correlation と呼ばれる手法（鈴木，2009），とそれを改良した手法（以下 Modified CI Correlation: MCI Correlation と呼ぶ）の 2 つである。そのアルゴリズムの概要を図 2 に示す。どちらも CI の低いピクセルの方位データを、その周囲に存在する CI の高い方位データに置換する手法であるが、その周囲のピクセルの持つデータの状態によって置換の仕方が異なる。Neighbor CI Correlation は、閾値以下の CI を有するピクセルの結晶方位と CI を、隣接するピクセルの内、最も CI の高いピクセルのものに置換する手法である（図 2 (a), (b)）。MCI Correlation は、閾値以下の CI を有するピクセルの結晶方位と CI を、隣接する閾値以上の CI を有するピクセルの内、同じ結晶粒のピクセルの数が最も多いものと置換する手法である（図 2 (a), (c)）。CI が一定値以上の結晶方位は、高確率で正しく指数付け出来ていることを意味するから、閾値以上の CI を有するピクセルの中から結晶方位を置換候補として選択すれば、（閾値の設定が適切であれば）正しい結晶方位を選択していることになる。インターフェースでは、全ての EBSD ピクセルに対して閾値以下の CI の探索を実施し、上記データクリーニングを行う。この操作を 1step とし、CI が閾値以下の EBSD ピクセルがなくなるまでこの操作を繰り返す。

MCI Correlation は、Neighbor Phase Correlation と呼ばれる手法（鈴木，2009）に類似である。Neighbor Phase Correlation は、ある閾値以下の CI を有するピクセルの相データと結晶方位データを、そのピクセルに隣接する閾値以上の CI を有するピクセルの内、最も面積割合の多い相の性質を持つピクセルのものと置換する手法である。MCI Correlation はそれを拡張した手法と位置づけることが出来る。本研究では、MCI Correlation を用いてデータクリーニングを実施した。

2・1・2 結晶方位の対称性を考慮した Euler 角の再決定

全体座標系と結晶座標系の回転関係は 3 つの Euler 角によって厳密に定義できる。しかし、結晶の面や方向には対称性があるので、等価な回転関係を表す複数の Euler 角が存在する。EBSD 法により取得したデータから商用のソフトウェアを用いて結晶方位を求めると、面や方向の Miller 指数が等価な方位でも、異なる Euler 角で結晶方位が表されることがある。このような Euler 角のデータをそのまま CPFЕ 解析に用いると、解析の効率を低下させる可能性がある。結晶格子の対称性を考慮して Euler 角を再決定し、その範囲を絞ると、等価な活動すべり系の数が減少し、解析結果が整理される。

本研究では、hcp 結晶の CPFЕ 解析を実施するため、以下では hcp 結晶の結晶格子の対称性およびその回転について説明する。図 3 に hcp の格子ベクトルおよび結晶座標系（図 3 (a)）と、Bunge 定義の Euler 角による結晶

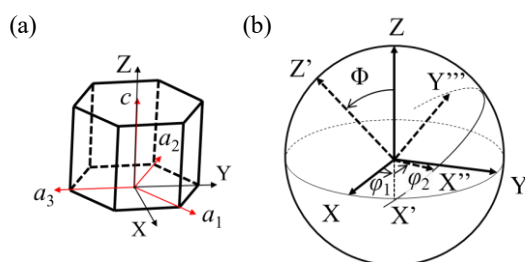


Fig. 3 Crystal coordinate system of hcp lattice (a) and the rotation by Bunge definition (b).

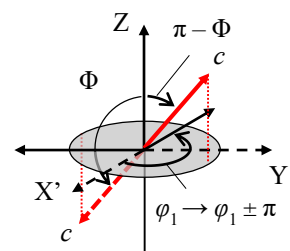


Fig. 4 Schematics showing the algorithm for modification of the inclination angles Φ when Φ is greater than $\pi/2$.

Table 1 Rules for modification of Eulerian angles depending on Φ .

	$0 \leq \Phi \leq \pi/2$	$\pi/2 < \Phi \leq \pi$
φ_1	φ_1	$\varphi_1 \pm \pi$
Φ	Φ	$\pi - \Phi$
φ_2	φ_2	$2\pi - \varphi_2$
	$\varphi_2 - n \cdot \pi/3 \quad (n = 0, 1, 2, \dots, 5)$	

座標系と全体座標系の回転関係（図 3 (b)）を示す．回転前の座標を $[X, Y, Z]^T$ ，回転後の座標を $[X'', Y'', Z'']^T$ とする．尚，上付きの'（プライム）の数は，回転による座標の変化回数を示し， T は転置行列であることを表す．Bunge 定義の Euler 角では，Z 軸回り-X 軸回り-Z 軸回りの順で，それぞれ回転角 φ_1 ， Φ ， φ_2 だけ，結晶座標系が全体座標系に対して回転する．その回転関係は次式で表せる．

$$\begin{bmatrix} X'' \\ Y'' \\ Z'' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi_2 & -\sin \varphi_2 & 0 \\ \sin \varphi_2 & \cos \varphi_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \Phi & -\sin \Phi \\ 0 & \sin \Phi & \cos \Phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \varphi_1 & -\sin \varphi_1 & 0 \\ \sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X \\ Y \\ Z \end{bmatrix} \quad (1)$$

φ_1 は c 軸（Z 軸）回りの回転であり，これにより c 軸の傾く方向が決まる． Φ は X' 軸回りの回転で， c 軸の傾きを意味する． φ_2 は， c 軸が Φ だけ傾いた後の c 軸（Z' 軸）回りの回転である．

結晶方位を表す Euler 角の範囲は， $0 \leq \varphi_1 < 2\pi$ ， $0 \leq \Phi < \pi$ ， $0 \leq \varphi_2 < 2\pi$ である（Engler and Randle, 2009）．この範囲を結晶格子の対称性を用いて絞ることを考える．ただし， c 軸の傾く方向の範囲（Z 軸回りの回転 φ_1 ）を制限しないものとする．hcp の結晶格子には，図 3 (a) の結晶座標系で考えると， c 軸（Z 軸）まわりに 6 回， a_1 軸， a_2 軸， a_3 軸， $a_1 - a_2$ 軸， $a_2 - a_3$ 軸， $a_3 - a_1$ 軸まわりに 2 回の回転対称性があり，単純六方晶と同じになる（吉永，2007）．単純六方晶は結晶底面の裏と表のどちらから見ても同じである．したがって，図 4 に示す様に， $\pi/2 < \Phi \leq \pi$ の場合は， c 軸の向きを逆にして， Φ を $0 \leq \Phi \leq \pi/2$ で表すことができる．ただし，この Φ の変換において， c 軸回りの回転角 φ_2 の回転方向は，底面の裏から見る場合と表から見る場合で逆になるから， $\varphi_2 \rightarrow 2\pi - \varphi_2$ となる．また， c 軸の傾く方向の角度 φ_1 は，Z 軸回りに反転するので， $0 \leq \varphi_1 < 2\pi$ に納まる様に π だけずらす必要がある．最後に， c 軸まわりの回転角 φ_2 の範囲は 6 回対称性を考慮すると $0 \leq \varphi_2 < \pi/3$ となる．上記手法によって Euler 角の範囲は， $0 \leq \varphi_1 < 2\pi$ ， $0 \leq \Phi \leq \pi/2$ ， $0 \leq \varphi_2 < \pi/3$ に絞ることが出来る．上記 Euler 角の変換方法をまとめると表 1 の様になる．

2・1・3 要素への材料特性の受渡し方法

結晶方位マップを要素分割し，CPFE 解析用の幾何モデルを作製する．幾何モデルの各要素（以下モデル要素とする）には，結晶方位マップから，結晶粒の識別番号と相，結晶方位等のデータを受け渡すが，EBSD の測定間隔（即ち結晶方位マップのピクセルサイズ）とモデル要素のサイズは通常異なるため，このデータの受け渡しには工夫が必要となる．データ受け渡しに用いたアルゴリズムを以下に説明する．

結晶方位マップからモデル要素へのデータ受け渡し方法の模式図を図 5 に示す．これらの図において，色の違いは結晶粒の違いを意味する．各結晶粒の識別は各結晶粒に異なる番号（以下結晶粒番号とする）を与えることによって行う．ただし，EBSD 結晶方位マップのピクセル（以下 EBSD ピクセルとする）は，同じ結晶粒番号でも EBSD ピクセルごとにそれぞれ異なる結晶方位が付与されている．しかしながら，モデル要素ごとには結晶方位は与えず，結晶方位は結晶粒ごとに与える．各結晶粒の代表結晶方位の算出方法については次節で述べる．

結晶粒番号の各要素への受渡し方法は，測定点がモデル要素内に存在しない可能性がある場合と，必ず一つは測定点が存在する場合で変化させる．EBSD ピクセルの各重心が EBSD 測定点であり，この場合分けは，EBSD 測定点の間隔とモデル要素のサイズを比較することで行う．測定点の間隔よりもモデル要素の辺が短い場合（図 5 (a)），対象とするモデル要素の結晶粒番号は，モデル要素の重心から最も近い重心を持つ EBSD ピクセルのも

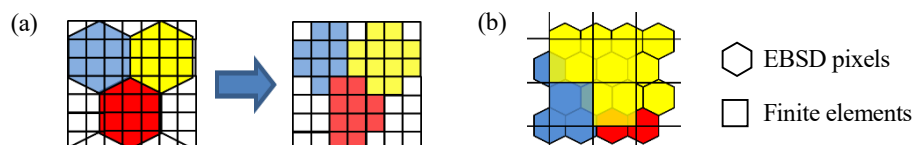


Fig. 5 Schematics showing methods to determine the character of each finite element in the condition that the sizes of elements are (a) smaller or (b) larger than the distance between measurement points in EBSD.

のとする。測定点の間隔よりもモデル要素の辺が長い場合、対象とするモデル要素の性質は、モデル要素内に存在する複数の EBSD ピクセル内、最も多数を占める EBSD ピクセルの結晶粒番号とする (図 5 (b))。ただし、本研究においては、要素内にある EBSD ピクセルが同数の場合、初めに検出した EBSD ピクセルのものを対象要素の結晶粒番号として用いた。

2・1・4 代表結晶方位の選定

代表結晶方位の選定方法として、例えば、結晶粒内の重心の結晶方位を用いる方法や、結晶粒内の結晶方位の平均を取る方法 (Spanos et al., 2008) が考えられる。どちらも、結晶粒と仮定した粒内に大きな結晶方位の違いがない場合にはよい近似となる。しかしながら、重心の結晶方位を用いる方法では、重心の結晶方位が粒内の他の場所の結晶方位と大きく異なる場合でも、その結晶方位が代表値となる可能性があり、平均を取る方法では、対象とする結晶粒内に大きく異なる結晶方位が存在した場合、その影響を受けて、結晶粒内に存在する結晶方位とは大きく異なる結晶方位が算出される可能性がある。本論文では、結晶粒と識別された結晶粒内に結晶方位の分布がある場合を想定して、代表結晶方位の選定アルゴリズムを新たに開発した。そのアルゴリズムを以下に説明する。

図 6 は、実装した代表結晶方位の選定アルゴリズムを模式的に示している。本アルゴリズムは、結晶粒内に存在する類似の結晶方位の割合の高さを、EBSD ピクセル (結晶方位測定点) ごとに評価し、結晶粒内でそれが最も高い点の結晶方位をその結晶粒の代表結晶方位とする方法である。類似の結晶方位の割合の高さの評価手法を説明する。図 6 (a) の青および赤の点は、EBSD の結晶方位測定点であり、黒線は結晶粒界を表す。結晶粒内の点 i に注目し、粒内のそれ以外の点を j とする。点 i と j の c 軸の方位差を α_c 、3 つの a 軸の方位差の内、最小の方位差を α_a とし、 α_c と α_a を軸とする直交座標系を図 6 (b) の様に定義する。この結晶方位差座標系 α_a - α_c での i とその近傍 j の距離 $\Delta\alpha_{ij}$ の関数 w の和を、結晶方位密度 W_i と定義し、粒子法的一种である Moving Particle Semi-implicit (MPS) 法 (Koshizuka and Oka, 1996) で用いられる粒子数密度と同様の式を用いて、次の様に計算する。

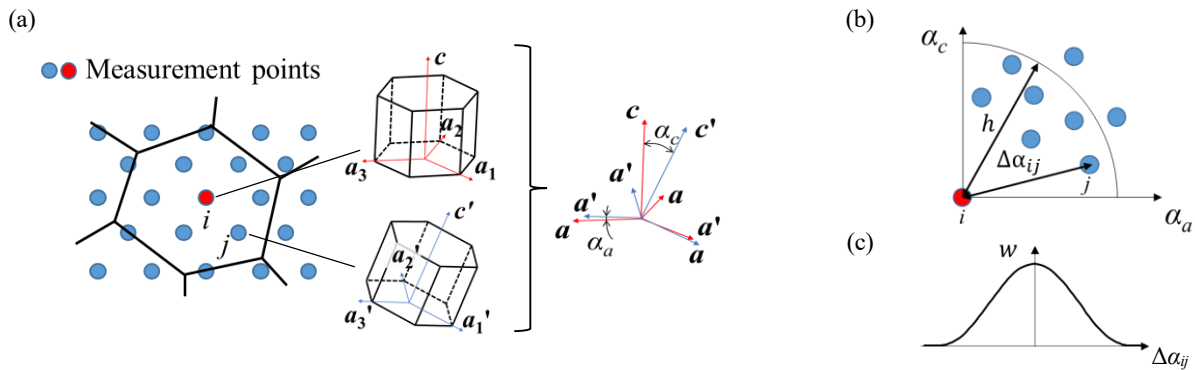


Fig. 6 Schematics showing the algorithm for the evaluation of misorientation densities. Misorientations of crystal lattices: α_a and α_c between points i and j within a crystal grain (a), misorientation $\Delta\alpha_{ij}$ between i and j in the α_a - α_c coordinate system (b), and the profile of weighted misorientation w as a function of $\Delta\alpha_{ij}$ (c).

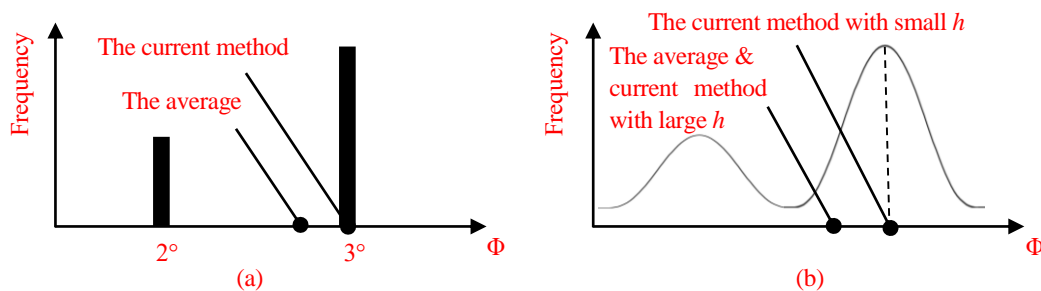


Fig.7 Representative crystal orientations given by the averages and current method when two peaks occur in the frequency distributions with discontinuity (a) and continuity (b).

$$W_i = \sum_{j \neq i} w(\Delta\alpha_{ij}, h) \quad (2)$$

ここで、 w は重み関数で、結晶方位差 $\Delta\alpha_{ij}$ が小さい程大きい値となる関数を用い、本論文では粒子法の一つである Smooth Particle Hydrodynamics (SPH) (Monaghan, 1988, Müller et al., 2003) の重み関数としてよく用いられる次式を用いた。

$$w(\Delta\alpha_{ij}, h) = \begin{cases} \frac{315}{64\pi h^9} (h^2 - \Delta\alpha_{ij}^2)^3, & 0 \leq \Delta\alpha_{ij} \leq h \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3)$$

h は影響角度であり、本論文では 3° とした。式 (3) によって得られる w と $\Delta\alpha_{ij}$ の関係は図 6 (c) の様になる。座標系 α_a - α_c で、座標原点の近くにデータ点が集積しているほど、点 i の方位に近い方位のピクセルが多いことになり、重み付き方位差プロファイル w (図 6 (c)) の和 W_i は高くなる。各結晶粒内の全てのピクセル点について W_i を計算し、 W_i が最も大きいピクセル点の方位をその結晶粒の代表結晶方位とする。上記は hcp 結晶を対象としてアルゴリズムを説明したが、結晶座標系の軸の区別を無くし、結晶座標系に直交座標系を用いると立方晶における代表結晶方位の選定アルゴリズムとなる。

以下では、平均を取る方法と本提案手法で得られる代表結晶方位の違いを、簡単な例を挙げて説明する。図 7 はその説明図である。ある一つの結晶粒内に、30 点の EBSD 測定点があったとする (図 7 (a))。簡単のため、それらの測定点において、Euler 角のパラメータ (ϕ_1, Φ, ϕ_2) の Φ にのみ結晶方位差があり、10 点は $\Phi = 2.0^\circ$ 、20 点は $\Phi = 3.0^\circ$ だったとする。この代表結晶方位は、平均を取る手法の場合、 $\Phi \approx 2.7^\circ$ となる。一方、本提案手法の場合、20 点存在する $\Phi = 3.0^\circ$ の結晶方位密度が高く評価され、その角度が代表結晶方位となる。即ち、提案する手法では、存在する結晶方位の中から、類似の結晶方位の多いものが選択される。

次に、前述のデルタ関数の様な分布ではなく、 Φ の分布が滑らかに変化する場合 (図 7 (b)) を考える。この場合、平均を取る手法では、二つのピークの間にある角度が代表結晶方位として算出される。一方、本提案手法では、影響角度 h の大きさによって、選択される代表結晶方位が異なる。 h が十分に大きい場合、二つのピークを跨いで結晶方位密度を評価するため、二つのピークの間にある角度が選ばれる。 h が小さい場合、片方の山の角度のみ評価され、より大きな山のピークの角度が選ばれる。

本提案手法による代表結晶方位の決定手法の特徴を挙げると次の様である。(i) h を大きく取ることによって、平均的な結晶方位が選択される。(ii) h を小さく取ることによって、類似の結晶方位が最も多い結晶方位が選択される。(iii) 測定された結晶方位の中から結晶方位は選択される。

2・1・5 分離した結晶粒の識別、結晶粒の統合、微細な結晶粒の削除

EBSD データを有限要素用の幾何モデルに変換する際、データクリーニングや、要素分割の影響により、空間的に分離しているにも関わらず同じ結晶粒番号が付与される場合がある。インターフェースでは、図 1①に示す様に、この分離した結晶粒に異なる結晶粒番号を付与し、区別する。この区別により、大きな結晶粒から分離した小さな結晶粒を識別できるようになり、解析の際に小さな結晶粒を任意で取り除くことが可能となる。

次に、結晶粒の統合アルゴリズムについて説明する。類似の結晶方位を有する隣接する結晶粒を統合することを考える。類似の結晶方位の識別には、2・1・4 節で説明した結晶の座標軸の差を用いる。図 12 に示す様に、隣接する結晶粒 i と j の結晶座標系の c 軸と a 軸の 2 つの軸の方位差が、それぞれ許容値以下の時、結晶粒を統合する。即ち、

$$j=i \quad \text{when} \quad \alpha_c \leq A_c \quad \text{and} \quad \alpha_a \leq A_a \quad (4)$$

である。上式において、 A_c および A_a はそれぞれ、 c 軸および a 軸の方位差の許容値である。類似な結晶方位を有する結晶粒の統合は、式(4)の条件を満たす結晶粒がなくなるまで実施する。

最後に微細な結晶粒の削除アルゴリズムについて説明する。インターフェースでは、結晶粒数の許容値を設定し、結晶粒数が許容値を超える場合、小さいサイズの結晶粒から順に、結晶粒を削除し、結晶粒数を調整する。具体的な手法を説明する。まず、各結晶粒の大きさ（各結晶粒の体積）を調べ、図1④に示す様に、結晶粒の大きさの順位が結晶粒数の許容値を超える場合、許容値を超える順位の結晶粒の存在する要素へ、許容値以内の順位の大きさの結晶粒を成長させる。具体的には、要素を順に調べ、削除すべき結晶粒内部の、結晶粒界と接する要素の結晶粒番号を、隣接する大きい結晶粒のものに変化させる。この操作を1ステップとし、削除すべき小さな結晶粒がなくなるまでこれを繰り返す。即ち、削除すべき小さな結晶粒のある領域をそれに隣接する大きい結晶粒が奪い成長する。以上のアルゴリズムにより、任意の精度で微視組織の粗視化を可能とする。

2・2 結晶塑性有限要素解析

CPFE 解析コード clp (Ohashi, 1987, 1994, 1997, 2005, Ohashi et al., 2007) を用いて解析を実施する。clp は、fcc (Kondou et al., 2008, Mayama et al., 2009, Ohashi and Kondou, 2013, 河野他, 2015), bcc (奥山, 大橋, 2016, Yasuda et al., 2017), hcp (大橋他, 2010, Kawano et al., in press) の3つの結晶系に用いられてきた。以下には、clp に実装されているモデル中で、本研究に用いたものを記す。弾塑性構成式は次式 (Hill, 1966) で与える。

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \left[S_{ijkl}^e + \sum_n \sum_m \left\{ h^{(nm)} \right\}^{-1} P_{ij}^{(n)} P_{kl}^{(m)} \right] \dot{\sigma}_{kl} \quad (5)$$

$\dot{\epsilon}_{ij}$ はひずみ増分、 S_{ijkl}^e は弾性コンプライアンス、 $\dot{\sigma}_{kl}$ は Cauchy の応力テンソルの増分、 $P_{ij}^{(n)}$ は Schmid テンソル、 m, n は活動すべり系を表している。Schmid 則が成立すると仮定し、各すべり系の活動条件は、各すべり系に加わる分解せん断応力が臨界分解せん断応力 (Critical Resolved Shear Stress: CRSS) を超えた時とする。 $h^{(nm)}$ はひずみ硬化係数である。CRSS は、次式に示す修正 Bailey-Hirsch モデル (Ohashi, 1994) を用いる。

$$\theta^{(n)} = \theta_0(T) + \sum_m a \mu \tilde{b} \Omega^{(nm)} \sqrt{\rho_s^{(m)}} \quad (6)$$

ここで、 θ_0 は運動転位に対する変形履歴に依存しない抵抗値、 a は 0.1 程度の数値係数、 μ はせん断弾性係数、 \tilde{b} はバーガースベクトルの大きさ、 $\Omega^{(nm)}$ は各すべり系に存在する転位の相互作用の強さを表す係数行列、 $\rho_s^{(m)}$ は統計的に蓄積する転位 (Statistically Stored dislocations : SS 転位) 密度である。SS 転位密度増分は、以下の式により与える (Ohashi, 1987)。

$$\dot{\rho}_s^{(m)} = \frac{c \dot{\gamma}^{(m)}}{\tilde{b} L^{(m)}} \quad (7)$$

c は 1 のオーダの数値係数、 $\dot{\gamma}$ は塑性せん断ひずみ増分である。 L は転位の平均自由工程であり、次式で与える (Ohashi, 2005)。

$$L^{(m)} = \frac{c^*}{\sqrt{\sum_k \omega^{(km)} (\rho_s^{(k)} + \|\rho_G^{(k)}\|)}} \quad (8)$$

c^* と $\omega^{(km)}$ はそれぞれ、転位の堆積のしやすさを表す数値係数、および転位の相互作用の強さを表す数値係数行列である。 $\|\rho_G\|$ は幾何学的に必要な転位 (Geometrically Necessary Dislocations: GN 転位) 密度のノルムである。GN 転位密度のノルムは次式より求める (Ohashi, 1997)。

$$\|\rho_G^{(m)}\| = \sqrt{(\rho_{G,edge}^{(m)})^2 + (\rho_{G,screw}^{(m)})^2} \quad (9)$$

$$\rho_{G,edge}^{(m)} = -\frac{1}{\tilde{b}} \frac{\partial \gamma^{(m)}}{\partial \xi^{(m)}} \quad (10)$$

$$\rho_{G,screw}^{(m)} = \frac{1}{\tilde{b}} \frac{\partial \gamma^{(m)}}{\partial \zeta^{(m)}} \quad (11)$$

ここで、 $\rho_{G,edge}^{(m)}$ と $\rho_{G,screw}^{(m)}$ はGN転位密度の刃状および螺旋成分である。 $\xi^{(m)}$ 、 $\zeta^{(m)}$ はそれぞれすべり方向およびそれに垂直な方向である。CRSSの増分は、次式で与える (Ohashi, 1987)。

$$\dot{\theta}^{(n)} = h^{(nm)} \dot{\gamma}^{(m)} \quad (12)$$

ひずみ硬化係数 $h^{(nm)}$ は、式 (6) – (8), (12) より以下の様に求まる。

$$h^{(nm)} = \frac{ac\mu\Omega^{(nm)}}{2L^{(m)}\sqrt{\rho_s^{(m)}}} \quad (13)$$

3. 供試材とその幾何モデルへの変換および変換アルゴリズムの妥当性

3・1 供試材

供試材として用いた純チタン (α -Ti) は、真空溶解後に熱間溝ロール圧延し、結晶粒粗大化を目的とした熱処理後、長さ 8 mm、幅 2 mm の観察面が取れる様に、図 8 に示す様に試験片を切出した。厚さは 0.5 mm である。試験片は、湿式研磨、電解研磨を経て、EBSD にて 3.00 μm 間隔で結晶方位測定した。次に、CI が 0.1 未満のデータをクリーニングした後、試料の観察面の一部から ND 方向の逆極点図 (Inverse Pole Figure: IPF) マップを作成した。このデータクリーニングの実施および IPF マップの作成には、EBSD 測定装置に付属する TSL Solutions 社製の EBSD データ解析用ソフトウェア OIM Analysis を用いた。OIM Analysis の使用により微視組織の描画や極点図の作成等も可能である。得られた IPF マップを図 9 に示す。

3・2 幾何モデルへの変換

3・2・1 結晶格子の対称性を考慮した Euler 角の再決定

CPFE 解析用の幾何モデルを作製するため、図 9 の IPF マップから、 $800 \times 1600 \mu\text{m}^2$ の範囲を切出す。切り出した結晶方位マップを Bunge 定義の Euler 角の 3 つのパラメータ (ϕ_1 , Φ , ϕ_2) でそれぞれ表示したものを図 10 に示す。図 10 は要素分割しておらず、結晶方位マップは EBSD ピクセルからなる。尚、インターフェースを用いて、2.1.1 節に述べたデータクリーニングを CI の閾値を 0.1 として実施したが、結晶方位マップに変化はないことは確認済みである。

IPF マップでは比較的均一に見えた結晶粒内の方位分布 (図 9) が、Euler 角の分布 (図 10 (a)) で見ると不均一であることがわかる。一方、図に示す様に結晶粒の一部を四角く抜き出して、その結晶方位の頻度分布を調べる (図 10 (b)) と、一つの結晶粒内に複数のピークが存在する。IPF マップは、等価な結晶の面を考慮して最小範囲でステレオ投影上にプロットしているため、Euler 角の分布が結晶粒内で不均一な理由は、結晶格子の等価な方位を表す複数の Euler 角が存在するためであると推察できる。2・1・4 節で説明した手法を用いて Euler 角を再決定する。

図 11 は、結晶格子の対称性を考慮して再決定した後の Euler 角の分布である。Euler 角のパラメータの範囲は、再決定前 (図 10(a)) では $0 \leq \phi_1 < 2\pi$, $0 \leq \Phi < \pi$, $0 \leq \phi_2 < 2\pi$ であったが、再決定後 (図 11) には、それぞれ $0 \leq \phi_1$

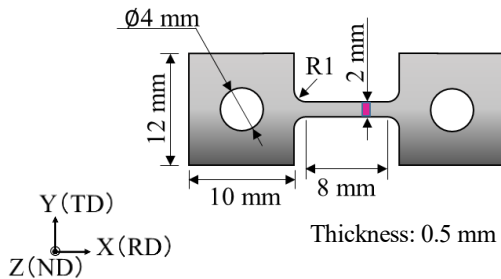


Fig. 8 The shape of specimen.

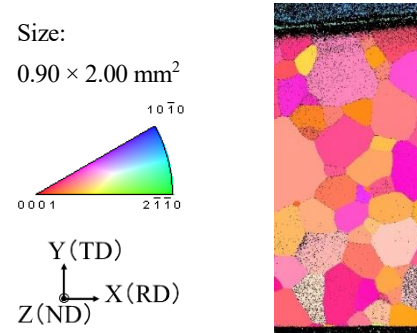


Fig. 9 Inverse Pole Figure (IPF) map obtained by EBSD analysis.

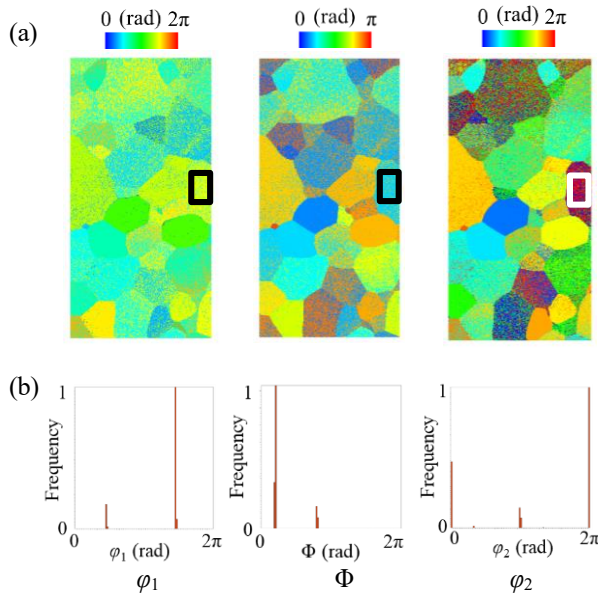


Fig. 10 Crystal orientation maps obtained by EBSD analysis (a) and the distributions of crystal orientations within a crystal grain (b). The numbers of EBSD pixels and crystal grains are 164164 and 349 within the area of observation, respectively.

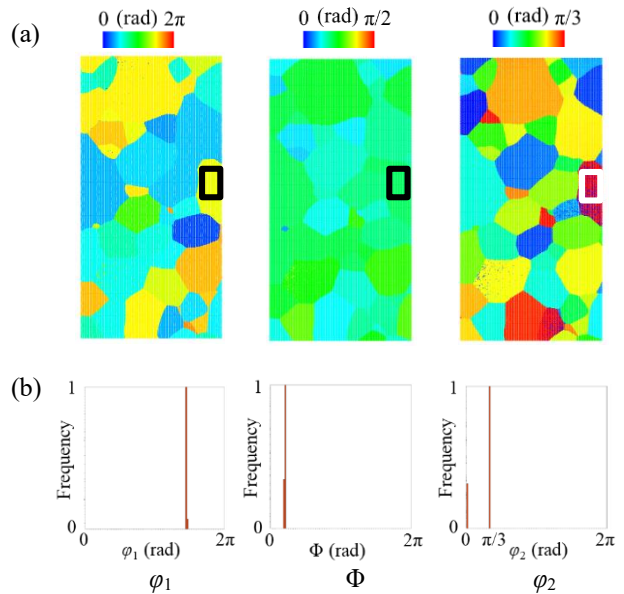


Fig. 11 Crystal orientation maps after the reassignment of Eulerian angles. Crystal orientation maps (a) and the distributions of crystal orientations within a crystal grain (b).

$<2\pi$, $0 \leq \Phi \leq \pi/2$, $0 \leq \varphi_2 < \pi/3$ と絞られた. また, 結晶粒内の結晶方位の頻度分布 (図 11 (b)) は, 複数あった結晶方位のピーク (図 10 (b)) が一つとなった. 以上より, インターフェースに実装した Euler 角の再決定アルゴリズムによって, Euler 角の範囲を絞ることが出来るのを確認した.

3・2・2 結晶方位マップの要素分割と代表結晶方位選定手法の妥当性

次に, 結晶方位再決定後の結晶方位マップ (図 11) を要素分割する. 2・1・3 節で述べた通り, EBSD ピクセルとモデル要素の大小関係により, 要素分割の際の各モデル要素の結晶粒番号の決定方法は変化する. EBSD ピクセルよりもモデル要素が小さい場合 (モデル要素数の方が EBSD ピクセル数よりも多い場合), モデル要素に EBSD ピクセルの持つデータをそのまま受け渡すことが出来るため, データの受け渡しには大きな問題は生じない. しかしながら, EBSD ピクセル数よりもモデル要素数が少ない場合, 一つのモデル要素内に複数存在する EBSD ピクセルの持つ結晶粒番号の中から一つの結晶粒番号を選ぶ必要がある. この選択の際には捨てるデータが現れ, 要素数の減少だけでなく結晶粒数の減少や結晶方位等の材料微視組織データの消失が起こる. 本節では, EBSD ピクセル数よりもモデル要素数が少ない条件で要素分割を行う. 各結晶粒には, 2・1・4 節で説明した手法を用いて代表結晶方位を付与し, 要素数および結晶粒数の変化が起こった場合に, 代表結晶方位の選定が意図した通りに行われているかを確認する.

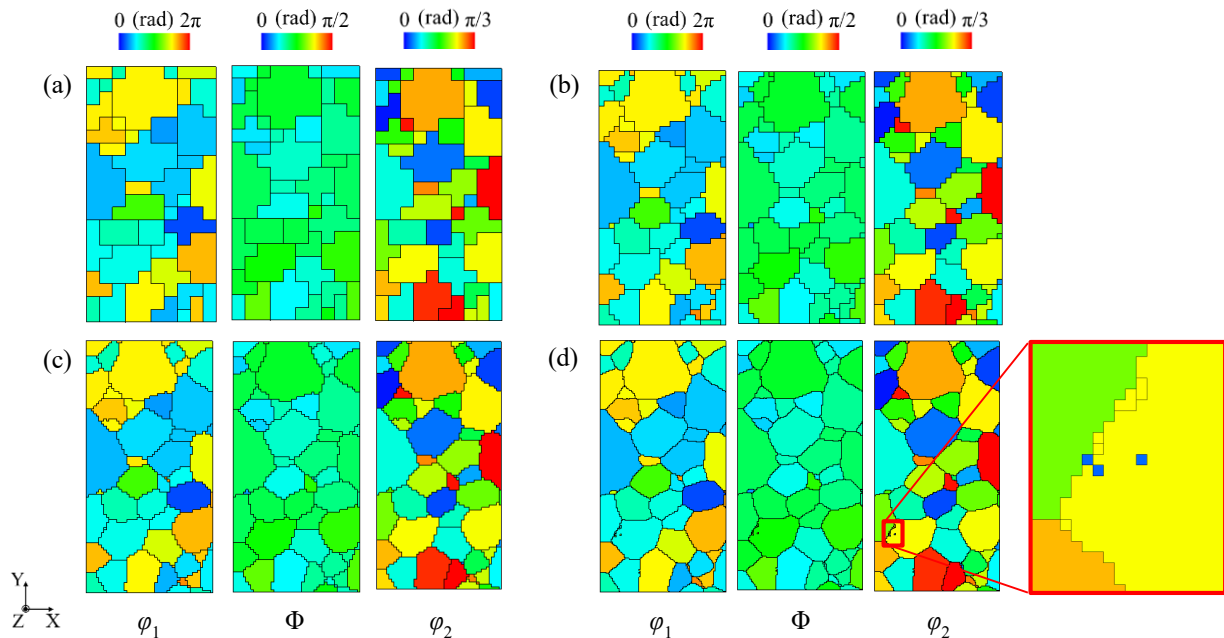


Fig. 12 Geometric models converted from EBSD orientation maps. Elements are (a) $10 \times 20 \times 2$, (b) $25 \times 50 \times 2$, (c) $50 \times 100 \times 2$, and (d) $100 \times 200 \times 2$. The numbers of grains are (a) 41, (b) 49, (c) 52, and (d) 60.

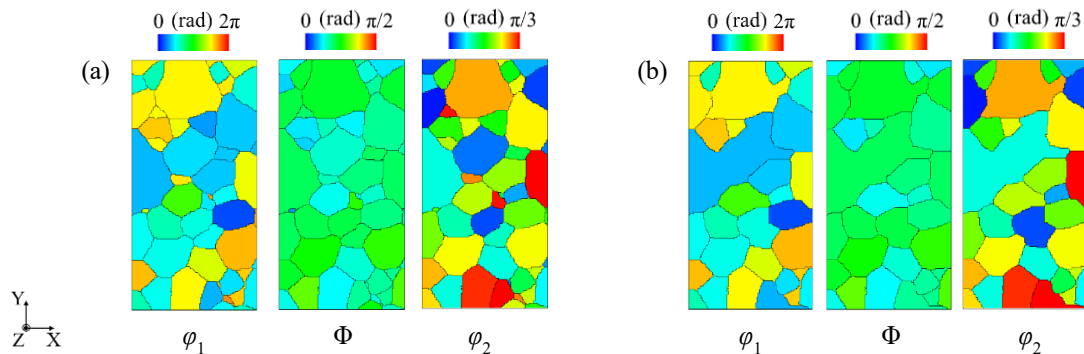


Fig. 13 Geometric models obtained when small crystal grains are eliminated (a) and neighboring crystal grains are integrated when misorientations $\Delta\alpha_a$ and $\Delta\alpha_e$ are smaller than 10° (b). The number of elements in both models is $100 \times 200 \times 2$. The numbers of grains are (a) 50 and (b) 30.

図 12 は幾何モデルの要素数依存性を示している。要素数の減少と共に結晶粒数は減少する。これは、一つのモデル要素内に複数の EBSD ピクセルが存在する場合、要素内で最も広い面積を占める結晶粒の番号がモデル要素に付与されるため、少数のピクセルから成る小さな結晶粒は、要素内で広い面積を占めることができずに、その結晶粒番号がモデル要素の代表値として選択されず消失したためである。一方、要素数が多いと、微細な結晶粒も消失することなく存在し、結晶粒数も多くなる（図 12 (d)）。このことは要素数の多寡によって微視組織の粗視化の程度を調節できることを示しており、意図した通り EBSD ピクセルとモデル要素間の結晶粒番号の受渡しが行われたことを示す。同時に、このことは、インターフェースで CPFЕ 解析のための正確な幾何モデルを作製する際は、モデル要素のサイズは結晶粒径により制限されることも示している。

次に、各結晶粒の代表結晶方位の要素数依存性を調べる。図 12 は、要素数の大小に関わらず、試料内の同じ座標に存在する結晶粒には同じ結晶方位が EBSD ピクセルから受け渡されたことを示している。このことは、代表結晶方位の選定アルゴリズムが意図した通りに働いていることを意味する。代表結晶方位の選定アルゴリズムが意図した通りに働いているかを、より厳しい条件で確認するため、次の条件で幾何モデルへのデータ変換を行った。まず、図 12 (d) の幾何モデルに微細な結晶粒の削除アルゴリズム（2・1・5 節）を用いて、図 13 (a) に示す様に結晶粒数を 50 個まで削減する。これを、図 13 (b) に示す様に、類似な結晶方位を持つ結晶粒の統合アルゴリズム（2・1・5 節）を用いて結晶格子の c 軸および a 軸の方位差が 10° 以内の隣接する結晶粒を統合する。統合された各結晶粒には代表結晶方位を付与する。代表結晶方位選定のアルゴリズムが正しく働けば、代表結晶方位は、その結晶粒内において近い結晶方位を有する最も大きなグループの中から選出される。即ち、統合された結晶粒には、その結晶粒を構成する統合前の結晶粒の結晶方位の内、最も大きな結晶粒のものが付与される。結晶粒の統合前後で、結晶方位の変化を調べると、統合後の結晶粒には、統合前の結晶粒の内、最も大きな結晶粒のものがついていることがわかる。即ち、代表結晶方位の選定アルゴリズムが意図した通りに働いていることが確認できた。

4. 結晶塑性有限要素解析

4・1 CPFЕ 解析用幾何モデルの作製と解析条件

次に、データクリーニング及び結晶方位を再決定後の結晶方位マップ（図 11）から要素数の異なる 3 つのモデルを作製する。作製した幾何モデルを図 14 に示す。要素数は (a) $25 \times 50 \times 2$ 、(b) $50 \times 100 \times 2$ 、(c) $100 \times 200 \times 2$ である。EBSD により取得したデータは 2 次元のものであるが、その幾何データを奥行方向に 2 要素分拡張し、CPFЕ 用幾何モデルは薄板の 3 次元モデルとした。各モデルの奥行方向のサイズは立方体要素の 2 つ分である。結晶粒数は、その許容値を 50 として、微細な結晶粒の削除アルゴリズム（2・1・5 節）を用いてその数を整え、(a) 49、(b) 50、(c) 50 とした。

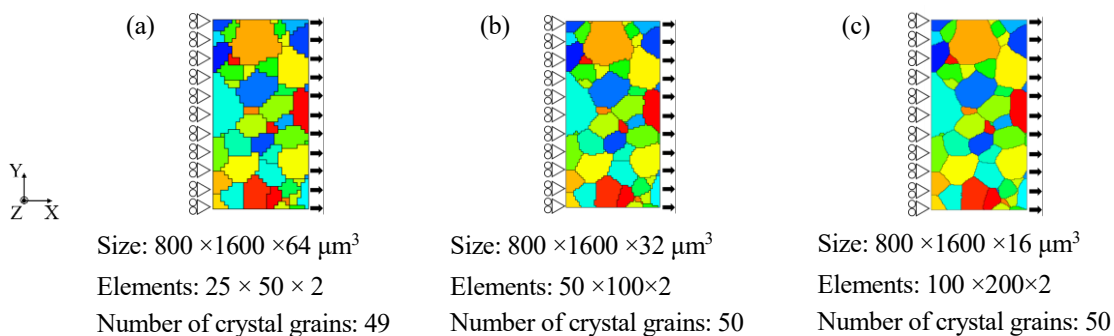


Fig. 14 Schematics showing the geometric models and the boundary conditions for CPFЕ analysis.

Table 2 Elastic compliances for pure-Ti with hcp structure $[(\text{TPa})^{-1}]$ (Fisher and Renken, 1964).

S_{11}	S_{12}	S_{13}	S_{33}	S_{44}
9.581	-4.623	-1.893	6.980	21.413

Table 3 CRSS for α -Ti [MPa] (Gong and Wilkinson, 2009, Amouzou et al., 2016).

Basal	Pri $\langle a \rangle$	Pyr $\langle a \rangle$	Pyr $\langle c+a \rangle$
209	181	-	-

各幾何モデルに与えた物性値について記す。物性値には純チタンのものを用いる。用いた弾性コンプライアンス (Fisher and Renken, 1964) を表 2 に示す。純チタンの活動すべり系は、底面、柱面<a>、一次錐面<a>、一次錐面<c+a>であるが、一次錐面<c+a>すべり系の CRSS は他のすべり系と比較して高く、一次錐面<a>すべり系の CRSS は、報告によってバラつきがある (Amouzou et al., 2016) 。ここでは、錐面すべり系はその活動度が低い場合を仮定して非活性とし、底面と柱面<a>すべり系の CRSS は表 3 に示す通り Gong and Wilkinson (2009) と Amouzou et al. (2016) の用いた値を参考にして決定した。初期転位密度は SS 転位のみで与え、試料内で均一に $1.8 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$ とした。負荷条件は図 14 に示す通り、モデルの左端面を X 軸方向固定し、右端面に対して X 軸方向に一軸引張の強制変位を与え、それ以外の面には拘束および表面力は与えないものとした。

4・2 一軸引張解析結果の要素数依存性

純チタンのイメージベース CPFE 解析の結果を図 15 に示す。図 15 は、弾性域 ($\overline{\varepsilon_{XX}} = 0.1\%$) および塑性域 ($\overline{\varepsilon_{XX}} = 1.0\%$) における X 軸方向の垂直応力 σ_{XX} および垂直ひずみ ε_{XX} と塑性域における GN 転位密度のノルム $\|\rho_G^{total}\|$ および SS 転位密度 ρ_S^{total} の分布を示している。

まず、弾性域と塑性域のそれぞれにおける σ_{XX} と ε_{XX} の要素数依存性を観察する。弾性域における σ_{XX} と ε_{XX} は、その最大値および最小値に要素数依存性があるものの、要素数に関わらず粒界近傍に高い値を示し、 σ_{XX} と

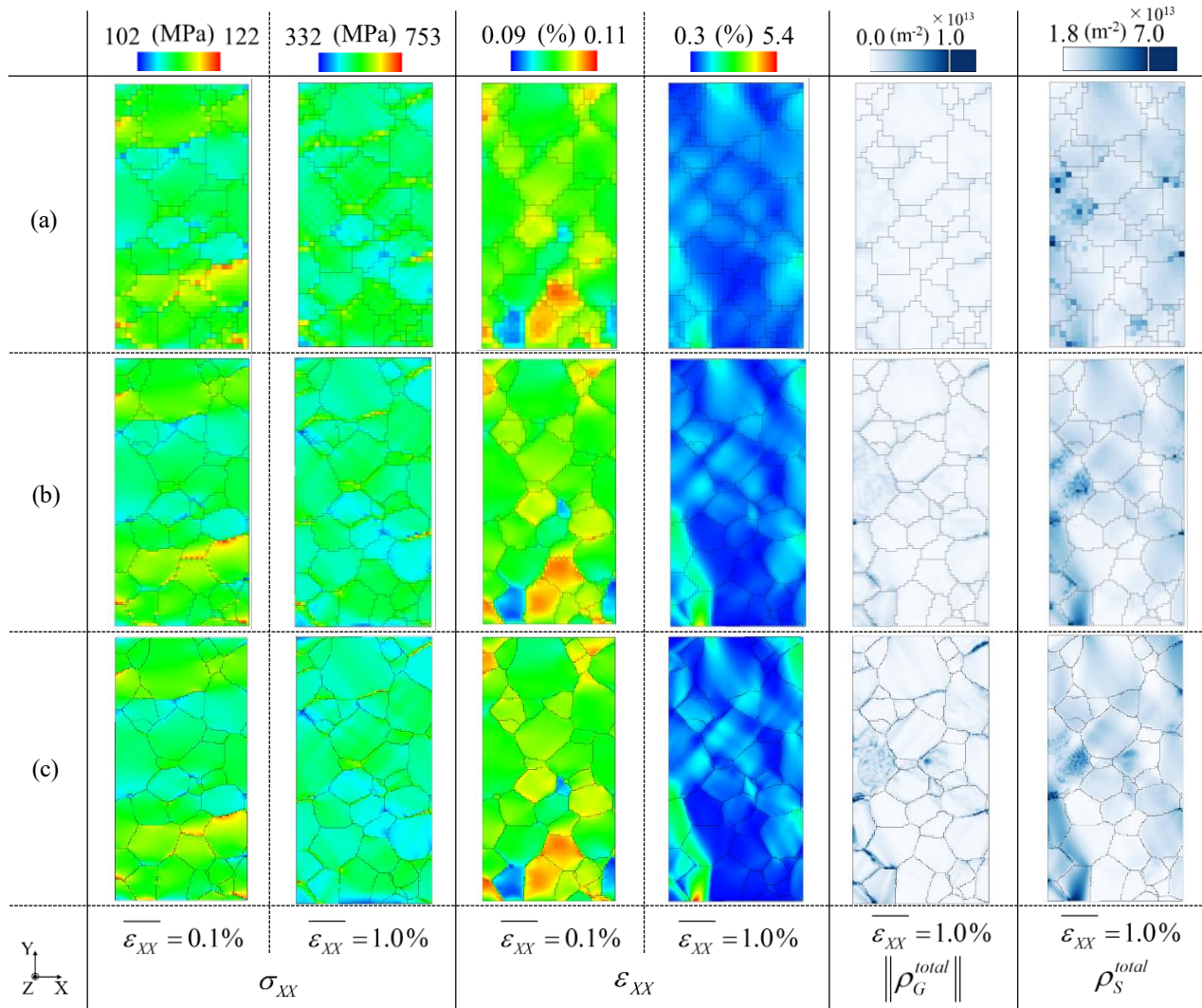


Fig. 15 Results obtained by the image-based crystal plasticity analysis when the numbers of elements are (a) $25 \times 50 \times 2$, (b) $50 \times 100 \times 2$, and (c) $100 \times 200 \times 2$.

ε_{xx} の分布の要素数依存性は小さいように見える．塑性域に入ってもそれらの分布は要素数が多い場合と少ない場合で類似である．

上記の様に、定性的には弾塑性域における応力とひずみの分布に対する要素数依存性は小さいことがわかった．しかしながら、塑性域の分布において、 σ_{xx} よりも ε_{xx} の方が、要素数の増加に伴い、高い値と低い値の差がよりはっきりとする様に見える．これは、降伏を開始した要素の応力の最大値は CRSS によって決まるため、塑性域における応力の最大値と最小値の差は広がりにくい、ひずみにはその制約がないためと考えられる．

次に、転位密度の分布を調べる．まず、GN 転位密度のノルムを全すべり系で足し合わせたもの $\|\rho_G^{total}\|$ を観察する．要素数が多い方が、塑性せん断ひずみの高低がより顕著に現れるため、ひずみの勾配から計算される GN 転位密度の高さも、要素数が多い程その最大値は高くなる．ひずみの勾配が高くなりやすい結晶粒界近傍では、その傾向は特に顕著である．一方、SS 転位密度を全すべり系で足し合わせたもの ρ_S^{total} は、要素数が多いほど、その高低がはっきりとするものの、GN 転位密度ほどの要素数依存性は見られない．即ち、塑性せん断ひずみの空間的勾配から算出される GN 転位密度のノルムの分布の方が、SS 転位密度の分布より空間離散の細かさの影響を受けやすいことがわかる．

上記解析結果の要素数依存性をより定量的に評価するため、頻度分布を作成した．結果を図 16 に示す．図 16 において、ビンの数（分割数）は 20 とし、横軸の最大値および最小値は、解析結果より得られた最大値および最小値に対応する．尚、縦軸は正規化し、一つのビンに全ての要素が属する場合、その値が 1 となる様にした．図 16 に示した σ_{xx} 、 ε_{xx} 、 $\|\rho_G^{total}\|$ 、 ρ_S^{total} の全ての頻度分布において、上述の図 15 を用いた説明と同じ傾向が見られる．即ち、弾性域と塑性域のどちらの場合においても、その分布は要素数が変化しても定性的には同じである．しかしながら、塑性域においては、分布に要素数依存性を示すものが現れる．塑性域の ε_{xx} の分布および、塑性せん断ひずみの勾配から算出される $\|\rho_G^{total}\|$ の頻度分布は要素数依存性が大きい．その理由は上述の通りである．

以上より、要素数の異なる幾何モデルを用いて CPFE 解析を実施しても、結晶粒数および各々の結晶粒の配置が保たれていれば、定性的には同じ結果を得られることがわかる．即ち、本論文で述べたインターフェースを用

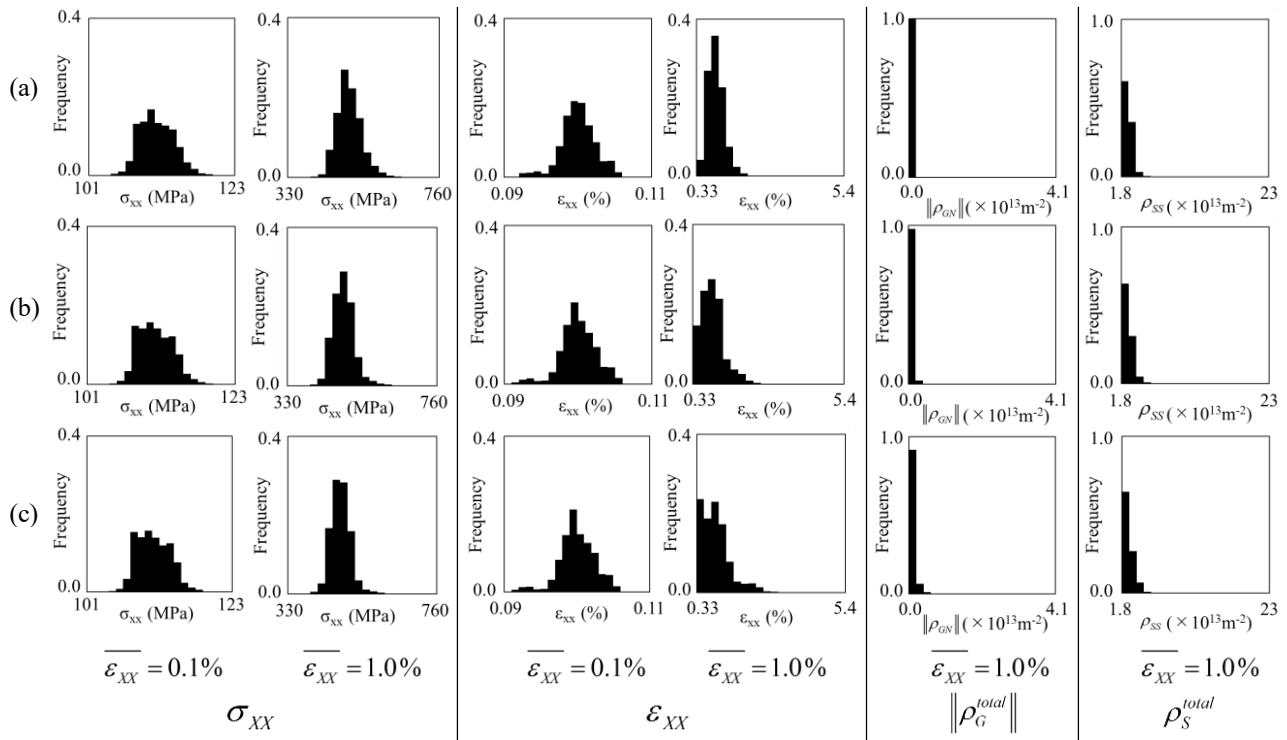


Fig. 16 Histograms showing changes in frequency distributions of physical quantities when the numbers of elements are (a) $25 \times 50 \times 2$, (b) $50 \times 100 \times 2$, and (c) $100 \times 200 \times 2$.

いて試料全体の解像度を下げ、解析領域の大きな幾何モデルを作製し、結晶塑性解析を実施しても、結晶粒数の大きな減少とその位置の変化が起こっていなければ、定性的には同じ結果が得られることを示している。ただし、GN 転位密度は、要素数の変化の影響を受けやすい。GN 転位密度の変化は、加工硬化率の変化等の物性値の変化を引き起こすため、繰り返し負荷や、大きなひずみの条件で解析を行う際には十分な配慮が必要である。

5. 結 言

EBSD により取得した材料の結晶方位マップデータを結晶塑性有限要素 (CPFE) 解析用の幾何モデルに変換するインターフェースを開発した。その妥当性の検証のため、本インターフェースを純チタンに適用し、得られた幾何モデルを用いてイメージベース CPFE 解析を実施した。得られた結果をまとめると、以下の様である。

- (1) EBSD により取得した結晶方位マップデータを CPFE 解析用の幾何モデルに変換するインターフェースを開発した。インターフェースには、データクリーニング機能、結晶格子の対称性を考慮して結晶方位を表す Euler 角の範囲を絞る機能、微細な結晶粒の削除や類似の結晶方位を有する結晶粒の統合等の微視組織の粗視化機能、代表結晶方位の選出機能等を実装した。
- (2) 本インターフェースを用いて CPFE 解析用幾何モデルを作製し、イメージベース CPFE 解析を実施したところ、結晶粒の数や配置の変化等の微視組織の大きな変化が起こっていなければ、要素数を変化させても定性的にはほぼ同様の結果が得られることを確認した。ただし、ひずみおよび GN 転位密度のノルムの分布は、応力と SS 転位密度の分布と比較して、要素数依存性が大きかった。

謝 辞

本研究の遂行に当たり金沢大学の下川智嗣教授および新山友暁助教、安田洋平研究員には有益な助言を頂いた。本研究の一部は、総合科学技術・イノベーション会議の SIP (戦略的イノベーション創造プログラム)「界面」を通じた、構造材料における未解決課題克服のための技術構築 (管理法人: JST) によって実施された。記して謝意を表す。

文 献

- Amouzou, K.E.K., Richeton, T., Roth, A., Lebyodkin, M.A. and Lebedkina, T.A., Micromechanical modeling of hardening mechanisms in commercially pure α -titanium in tensile condition, *International Journal of Plasticity*, Vol.80 (2016), pp.222-240, DOI:10.1016/j.ijplas.2015.09.008.
- Engler, O. and Randle, V., *Introduction to texture analysis: macrotexture, microtexture, and orientation mapping*, second edition, CRC Press (2009), p.35.
- Fisher, E.S. and Renken, C.J., Single-crystal elastic moduli and the hcp \rightarrow bcc transformation in Ti, Zr, and Hf, *Physical Review*, Vol.135, No.2A (1964), pp.482-494, DOI:10.1103/PhysRev.135.A482.
- Ghosh, S., Shahba, A., Tu, X., Huskins, E.L. and Schuster, B.E., Crystal plasticity FE modeling of Ti alloys for a range of strain-rates. Part II: Image-based model with experimental validation, *International Journal of Plasticity*, Vol.87 (2016), pp.69–85, DOI:10.1016/j.ijplas.2016.09.003.
- Gong, J. and Wilkinson, A.J., Anisotropy in the plastic flow properties of single-crystal α titanium determined from micro-cantilever beams, *Acta Materialia*, Vol. 57, No.19 (2009), pp. 5693-5705, DOI:10.1016/j.actamat.2009.07.064.
- Hill, R., Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.14, No.2 (1966), pp.95-102, DOI:10.1016/0022-5096(66)90040-8.
- Kawano, Y., Ohashi, T., Mayama, T. and Kondou, R., Crystal plasticity analysis of change in incompatibility and activities of slip systems in α -phase of Ti alloy under cyclic loading, *International Journal of Mechanical Sciences*, in press, DOI:10.1016/j.ijmecsci.2017.09.023.
- 河野義樹, 田丸直也, 石井悟, 眞山剛, 近藤了嗣, 大橋鉄也, 双結晶モデルの生じる GN 転位パターンと密度の粒界傾斜依存性, *日本機械学会論文集*, Vol. 81, No. 824 (2015), DOI:10.1299/transjsme.14-00630.
- Kondou, R., Ohashi, T. and Miura, S., Relationship between micro-incompatibility and heterogeneity of dislocation density distribution in Cu-9at.% Al symmetric type bicrystal models under tensile loading, *Journal of Computational Science and*

- Technology, Vol.2 (2008), pp.162–172, DOI:10.1299/jcst.2.162.
- Koshizuka, S. and Oka, Y., Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid, Nuclear Science and Engineering, Vol.123 (1996), pp.421–434, DOI:10.13182/NSE96-A24205.
- Lewis, A.C., Bingert, J.F., Rowenhorst, D.J., Gupta, A. and Geltmacher, A.B., Two- and three-dimensional microstructural characterization of a super-austenitic stainless steel, Materials Science and Engineering A, Vol.418, No.1-2 (2006), pp.11–18, DOI:10.1016/j.msea.2005.09.088.
- Lewis, A.C. and Geltmacher, A.B., Image-based modeling of the response of experimental 3D microstructures to mechanical loading, Scripta Materialia, Vol.55, No.1 (2006), pp.81–85, DOI:10.1016/j.scriptamat.2006.01.043.
- Mayama, T., Ohashi, T. and Kondou, R., Geometrically necessary dislocation structure organization in FCC bicrystal subjected to cyclic plasticity, International Journal of Plasticity, Vol.25, No.11 (2009), pp.2122–2140, DOI:10.1016/j.ijplas.2009.02.001.
- Mayeur, J.R. and McDowell, D.L., A three-dimensional crystal plasticity model for duplex Ti-6Al-4V, International Journal of Plasticity, Vol.23, No.9 (2007), pp. 1457–1485, DOI:10.1016/j.ijplas.2006.11.006.
- Monaghan, J.J., An introduction to SPH, Computer Physics Communications, Vol.48, No.1 (1988), pp.89–96, DOI:10.1016/0010-4655(88)90026-4.
- Morikawa, T., Mitani, Y. and Higashida, K., Inhomogeneous deformation observed using high-precision markers drawn by electron beam lithography in a magnesium alloy with LPSO phase, Materials Science Forum, Vol.638–642 (2010), pp.1574–1578, DOI:10.4028/www.scientific.net/MSF.638-642.1574.
- Müller, M., Charypar, D. and Gross, M., Particle-based fluid simulation for interactive applications, Proceedings of the 2003 ACM SIGGRAPH/Eurographics symposium on computer animation, No.5 (2003), pp.154–159.
- Ohashi, T., Computer simulation of non-uniform multiple slip in face centered cubic bycrystals, Transactions of the Japan Institute of Metals, Vol.28, No.11 (1987), pp.906–915, DOI:10.2320/matertrans1960.28.906.
- Ohashi, T., Numerical modelling of plastic multislip in metal crystals of f.c.c. type, Philosophical Magazine A, Vol. 70 (1994), pp.793–803, DOI:10.1080/01418619408242931.
- Ohashi, T., Finite-element analysis of plastic slip and evolution of geometrically necessary dislocations in fcc crystals, Philosophical Magazine Letters, Vol.75, No.2 (1997), pp.51–58, DOI:10.1080/095008397179741.
- Ohashi, T., Crystal plasticity analysis of dislocation emission from micro voids, International Journal of Plasticity, Vol.21, No.11 (2005), pp.2071–2088, DOI:10.1016/j.ijplas.2005.03.018.
- Ohashi, T., A multiscale approach for modeling scale-dependent yield stress in polycrystalline metals, International Journal of Plasticity, Vol.23 (2007), pp.897–914, DOI:10.1016/j.ijplas.2006.10.002.
- 大橋鉄也, 深尾亮太, 伊藤陽介, 眞山剛, HCP 双結晶の塑性すべりによって生ずる回位型変形場と応力集中, 日本機械学会論文集 A 編, Vol.76, No.764 (2010), pp.367–369.
- Ohashi, T. and Kondou, R., Evolution of dislocation patterns in a tricrystal model subjected to cyclic loading, Philosophical Magazine, Vol.93, No.4 (2013), pp.366–387, DOI:10.1080/14786435.2012.721017.
- 奥山彫夢, 大橋鉄也, 硬質な球状微粒子を含む二相合金の加工硬化に関する数値モデリング, 鉄と鋼, Vol.102, No.7 (2016), pp.32–40, DOI: <http://dx.doi.org/10.2355/tetsutohagane.TETSU-2015-096>.
- Pan, B., Qian, K., Xie, H. and Asundi, A., Two-dimensional digital image correlation for in-plane displacement and strain measurement: a review, Measurement Science and Technology, Vol.6, No.6 (2009), DOI:10.1088/0957-0233/20/6/062001.
- Raabe, D., Sachtlaber, M., Zhao, Z. and Zaefferer, S., Micromechanical and macromechanical effects in grain scale polycrystal plasticity experimentation and simulation, Vol.49, No.17 (2001), pp.3433–3441, DOI:10.1016/S1359-6454(01)00242-7.
- Roters, F., Eisenlohr, P., Hantcherli, L., Tjahjanto, D.D., Bieler, T.R. and Raabe, D., Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications, Acta Materialia, Vol.58 (2010), pp.1152–1211, DOI:10.1016/j.actamat.2009.10.058.
- Roters, F., Eisenlohr, P., Kords, C., Tjahjanto, D.D., Diehl, M. and Raabe, D., DAMASK, The düsseldorf advanced material simulation kit for studying crystal plasticity using an fe based or a spectral numerical solver, Prodedia IUTAM, Vol.3 (2012), pp.3–10, DOI: 10.1016/j.piutam.2012.03.001.
- Spanos, G., Rowenhorst, D.J., Lewis, A.C. and Geltmacher, A.B., Combining serial sectioning, EBSD analysis, and image-based finite element modeling, MRS Bulletin, Vol.33, No.06 (2008), pp.597–602, DOI:10.1557/mrs2008.124.
- 鈴木清一, EBSD 読本 –OIM を使用するにあたって–, 第3版, 株式会社 TSL ソリューションズ (2009).
- 辻伸泰, 種々の結晶方位解析法と SEM/EBSD 法の原理, 日本金属学会・鉄鋼協会関西支部平成 20 年度材料セミ

ナー資料 (2008).

- Wilkinson, A.J., A new method for determining small misorientations from electron back scatter diffraction patterns, *Scripta Materialia*, Vol.44, No.10 (2001), pp.2379-2385, DOI:10.1016/S1359-6462(01)00943-5.
- Yasuda, Y., Ohashi, T., Shimokawa, T. and Niiyama, T., Strain-hardening characteristics of ferrite layers in pearlite microstructure, *Materials Science and Technology*, in press, DOI:10.1080/02670836.2017.1397941.
- 吉永日出男, 稠密六方晶金属の変形双晶 マグネシウムを中心として, 内田老鶴園 (2007), p.91.
- Zhang, C, Li, H., Eisenlohr, P., Liu, W., Boehlert, C. J., Crimp, M. A. and Bieler, T.R., Effect of realistic 3D microstructure in crystal plasticity finite element analysis of polycrystalline Ti-5Al-2.5Sn, *International Journal of Plasticity*, Vol.69 (2015), pp.21-35, DOI:10.1016/j.ijplas.2015.01.003.

References

- Amouzou, K.E.K., Richeton, T., Roth, A., Lebyodkin, M.A. and Lebedkina, T.A., Micromechanical modeling of hardening mechanisms in commercially pure α -titanium in tensile condition, *International Journal of Plasticity*, Vol.80 (2016), pp.222-240, DOI:10.1016/j.ijplas.2015.09.008.
- Engler, O. and Randle, V., *Introduction to texture analysis: macrotexture, microtexture, and orientation mapping*, second edition, CRC Press (2009), p.35.
- Fisher, E.S. and Renken, C.J., Single-crystal elastic moduli and the hcp \rightarrow bcc transformation in Ti, Zr, and Hf, *Physical Review*, Vol.135, No.2A (1964), pp.482-494, DOI:10.1103/PhysRev.135.A482.
- Ghosh, S., Shahba, A., Tu, X., Huskins, E.L. and Schuster, B.E., Crystal plasticity FE modeling of Ti alloys for a range of strain-rates. Part II: Image-based model with experimental validation, *International Journal of Plasticity*, Vol.87 (2016), pp.69-85, DOI:10.1016/j.ijplas.2016.09.003.
- Gong, J. and Wilkinson, A.J., Anisotropy in the plastic flow properties of single-crystal α titanium determined from micro-cantilever beams, *Acta Materialia*, Vol. 57, No.19 (2009), pp. 5693-5705, DOI:10.1016/j.actamat.2009.07.064.
- Hill, R., Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.14, No.2 (1966), pp.95-102, DOI:10.1016/0022-5096(66)90040-8.
- Kawano, Y., Ohashi, T., Mayama, T. and Kondou, R., Crystal plasticity analysis of change in incompatibility and activities of slip systems in α -phase of Ti alloy under cyclic loading, *International Journal of Mechanical Sciences*, in press, DOI:10.1016/j.ijmecsci.2017.09.023.
- Kawano, Y., Tamaru, N., Ishii, S., Mayama, T., Kondou, R. and Ohashi, T., Grain boundary inclination dependence of GN dislocation patterns and density in bicrystal model, *Transactions of the JSME (in Japanese)*, Vol.81, No.824 (2015), DOI:10.1299/transjsme.14-00630.
- Kondou, R., Ohashi, T. and Miura, S., Relationship between micro-incompatibility and heterogeneity of dislocation density distribution in Cu-9at.% Al symmetric type bicrystal models under tensile loading, *Journal of Computational Science and Technology*, Vol.2 (2008), pp.162-172, DOI:10.1299/jcst.2.162.
- Koshizuka, S. and Oka, Y., Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid, *Nuclear Science and Engineering*, Vol.123 (1996), pp.421-434, DOI:10.13182/NSE96-A24205.
- Lewis, A.C., Bingert, J.F., Rowenhorst, D.J., Gupta, A. and Geltmacher, A.B., Two- and three-dimensional microstructural characterization of a super-austenitic stainless steel, *Materials Science and Engineering A*, Vol.418, No.1-2 (2006), pp.11-18, DOI: 10.1016/j.msea.2005.09.088.
- Lewis, A.C. and Geltmacher, A.B., Image-based modeling of the response of experimental 3D microstructures to mechanical loading, *Scripta Materialia*, Vol.55, No.1 (2006), pp.81-85, DOI:10.1016/j.scriptamat.2006.01.043.
- Mayama, T., Ohashi, T. and Kondou, R., Geometrically necessary dislocation structure organization in FCC bicrystal subjected to cyclic plasticity, *International Journal of Plasticity*, Vol.25, No.11 (2009), pp.2122-2140, DOI:10.1016/j.ijplas.2009.02.001.
- Mayeur, J.R. and McDowell, D.L., A three-dimensional crystal plasticity model for duplex Ti-6Al-4V, *International Journal of Plasticity*, Vol.23, No.9 (2007), pp. 1457-1485, DOI:10.1016/j.ijplas.2006.11.006.
- Monaghan, J.J., An introduction to SPH, *Computer Physics Communications*, Vol.48, No.1 (1988), pp.89-96, DOI:10.1016/0010-4655(88)90026-4.
- Morikawa, T., Mitani, Y. and Higashida, K., Inhomogeneous deformation observed using high-precision markers drawn by electron beam lithography in a magnesium alloy with LPSO phase, *Materials Science Forum*, Vol.638-642 (2010),

- pp.1574-1578, DOI:10.4028/www.scientific.net/MSF.638-642.1574.
- Müller, M., Charypar, D. and Gross, M., Particle-based fluid simulation for interactive applications, Proceedings of the 2003 ACM SIGGRAPH/Eurographics symposium on computer animation, No.5 (2003), pp.154-159.
- Ohashi, T., Computer simulation of non-uniform multiple slip in face centered cubic bycrystals, Transactions of the Japan Institute of Metals, Vol.28, No.11 (1987), pp.906-915, DOI:10.2320/matertrans1960.28.906.
- Ohashi, T., Numerical modelling of plastic multislip in metal crystals of f.c.c. type, Philosophical Magazine A, Vol. 70 (1994), pp.793-803, DOI:10.1080/01418619408242931.
- Ohashi, T., Finite-element analysis of plastic slip and evolution of geometrically necessary dislocations in fcc crystals, Philosophical Magazine Letters, Vol.75, No.2 (1997), pp.51-58, DOI:10.1080/095008397179741.
- Ohashi, T., Crystal plasticity analysis of dislocation emission from micro voids, International Journal of Plasticity, Vol.21, No.11 (2005), pp.2071-2088, DOI:10.1016/j.ijplas.2005.03.018.
- Ohashi, T., A multiscale approach for modeling scale-dependent yield stress in polycrystalline metals, International Journal of Plasticity, Vol.23 (2007), pp.897-914, DOI:10.1016/j.ijplas.2006.10.002.
- Ohashi, T., Fukao, R., Ito, Y. and Mayama, T., Crystal plasticity analysis of the disclination type deformation field and stress concentration in a HCP bicrystal(<Special Issue>M & M 2009 Conference), Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A, Vol.76 (2010), pp.367-369 (in Japanese).
- Ohashi, T. and Kondou, R., Evolution of dislocation patterns in a tricrystal model subjected to cyclic loading, Philosophical Magazine, Vol.93, No.4 (2013), pp.366-387, DOI:10.1080/14786435.2012.721017.
- Okuyama, Y. and Ohashi, T., Numerical modeling for strain hardening of two-phase alloys with dispersion of hard spherical particles, Tetsu-to-Hagane, Vol.102, No.7 (2016), pp.32-40 (in Japanese), DOI: <http://dx.doi.org/10.2355/tetsutohagane.TETSU-2015-096>.
- Pan, B., Qian, K., Xie, H. and Asundi, A., Two-dimensional digital image correlation for in-plane displacement and strain measurement: a review, Measurement Science and Technology, Vol.6, No.6 (2009), DOI:10.1088/0957-0233/20/6/062001.
- Raabe, D., Sachtlauer, M., Zhao, Z. and Zaeferrer, S., Micromechanical and macromechanical effects in grain scale polycrystal plasticity experimentation and simulation, Vol.49, No.17 (2001), pp.3433-3441, DOI:10.1016/S1359-6454(01)00242-7.
- Roters, F., Eisenlohr, P., Hantcherli, L., Tjahjanto, D.D., Bieler, T.R. and Raabe, D., Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications, Acta Materialia, Vol.58 (2010), pp.1152-1211, DOI:10.1016/j.actamat.2009.10.058.
- Roters, F., Eisenlohr, P., Kords, C., Tjahjanto, D.D., Diehl, M. and Raabe, D., DAMASK, The düsseldorf advanced material simulation kit for studying crystal plasticity using an fe based or a spectral numerical solver, Prodedia IUTAM, Vol.3 (2012), pp.3-10, DOI: 10.1016/j.piutam.2012.03.001.
- Spanos, G., Rowenhorst, D.J., Lewis, A.C. and Geltmacher, A.B., Combining serial sectioning, EBSD analysis, and image-based finite element modeling, MRS Bulletin, Vol.33, No.06 (2008), pp.597-602, DOI:10.1557/mrs2008.124.
- Suzuki, S., Reading book of EBSD – in use –, TSL Solutions (2009), (in Japanese).
- Tsuji, N., Various methods of crystal orientation analyses and principles of SEM/EBSD, The document of the material seminar 2008 by the Kansai division of the Japan Institute of Metals and Materials and the iron and steel institute of Japan (2008), (in Japanese).
- Wilkinson, A.J., A new method for determining small misorientations from electron back scatter diffraction patterns, Scripta Materialia, Vol.44, No.10 (2001), pp.2379-2385, DOI:10.1016/S1359-6462(01)00943-5.
- Yasuda, Y., Ohashi, T., Shimokawa, T. and Niiyama, T., Strain-hardening characteristics of ferrite layers in pearlite microstructure, Materials Science and Technology, in press, DOI:10.1080/02670836.2017.1397941.
- Yoshinaga, H., Deformation twinning in hexagonal close-packed metal – with a central focus on Magnesium –, Uchidarokakuho (2007), p.91 (in Japanese).
- Zhang, C, Li, H., Eisenlohr, P., Liu, W., Boehlert, C. J., Crimp, M. A. and Bieler, T.R., Effect of realistic 3D microstructure in crystal plasticity finite element analysis of polycrystalline Ti-5Al-2.5Sn, International Journal of Plasticity, Vol.69 (2015), pp.21-35, DOI: 10.1016/j.ijplas.2015.01.003.