

# Multi-phase-field法による動的再結晶のモデリングとシミュレーション

高木知弘<sup>1,\*</sup>, 久國陽介<sup>2</sup>, 富田佳宏<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科

<sup>2</sup> 神戸大学大学院工学研究科

\* <http://www.cis.kit.ac.jp/~takaki/> e-mail: takaki@kit.ac.jp

## はじめに

熱間で低中積層欠陥エネルギーを有する金属材料を加工する場合、変形による転位蓄積に起因する硬化と、回復と粒成長による軟化が同時に生じる動的再結晶(Dynamic Recrystallization: DRX)が生じ、微視組織発展に依存した特長的な力学的特性を示す。

本研究では、変形と回復による転位密度変化をKocks-Meching (KM)モデルにより、粒成長をMulti-phase-field (MPF)モデルにより表現する、Multi-phase-field動的再結晶(MPF-DRX)モデルを構築し、理論値との比較、報告されているcellular automaton (CA)法の結果との比較、初期粒サイズの影響評価を行う。

## MPF-DRXモデル

Kocks-Meching(KM)モデル→変形と回復による転位密度発展

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon} = \left(\frac{d\rho}{d\varepsilon}\right)_{hard} + \left(\frac{d\rho}{d\varepsilon}\right)_{soft} = k_1\sqrt{\rho} - k_2\rho$$

Multi-phase-fieldモデル→DRX多結晶粒成長シミュレーション

$$F = \int_V \left[ \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=\alpha+1}^N \left( -\frac{a_{\alpha\beta}^2}{2} \nabla\phi_{\alpha} \cdot \nabla\phi_{\beta} + W_{\alpha\beta}\phi_{\alpha}\phi_{\beta} \right) + f_e \right] dV \quad \sum_{\alpha=1}^N \phi_{\alpha} = 1$$

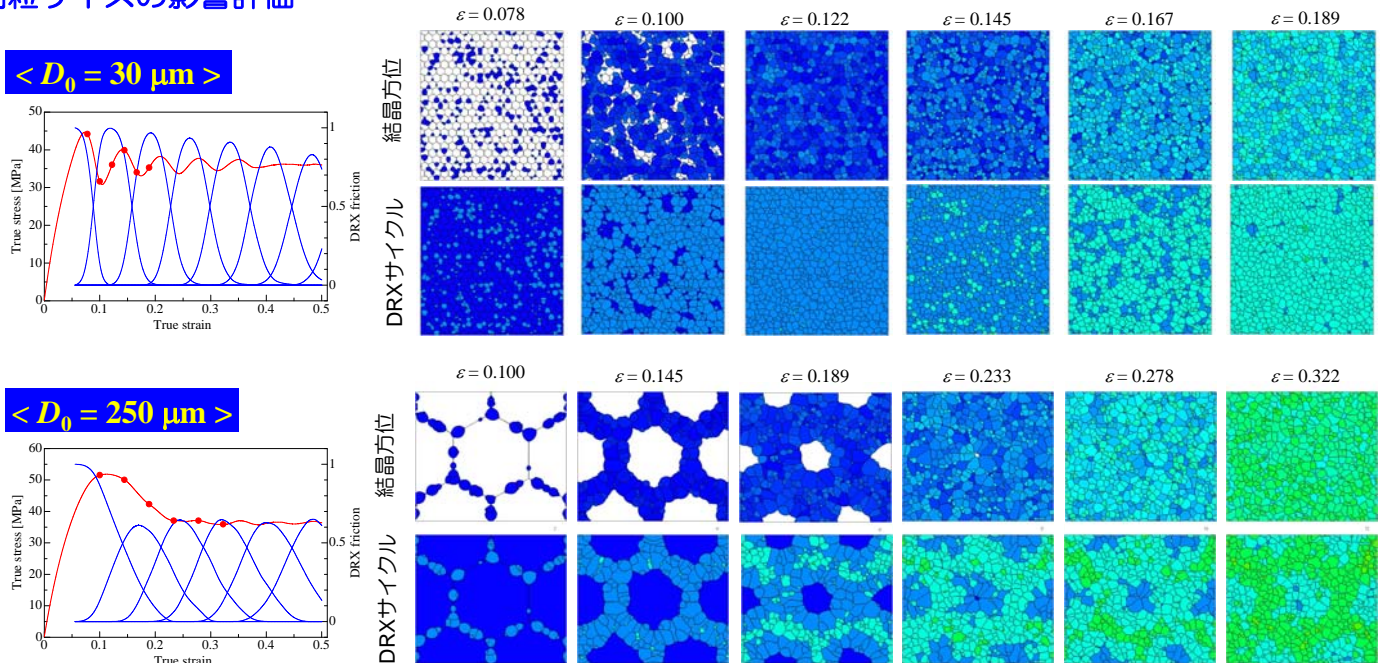
$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\sum_{j=1}^n \frac{2M_{ij}^{\phi}}{n} \left( \frac{\delta F}{\delta\phi_i} - \frac{\delta F}{\delta\phi_j} \right) \quad W_{ij} = \frac{4\gamma_{ij}}{\delta} \quad a_{ij} = \frac{2}{\pi} \sqrt{2\delta\gamma_{ij}} \quad M_{ij}^{\phi} = \frac{\pi^2}{8\delta} M_{ij}$$

$$= -\sum_{j=1}^n \frac{2M_{ij}^{\phi}}{n} \left[ \sum_{k=1}^n (W_{ik} - W_{jk})\phi_k + \frac{1}{2}(a_{ik}^2 - a_{jk}^2)\nabla^2\phi_k \right] - \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_i\phi_j} \Delta E_{ij}$$

Bailey-Hirschの式→平均転位密度から巨視的応力の算出

$$\sigma = \alpha\mu b \sqrt{\rho_{ave}}$$

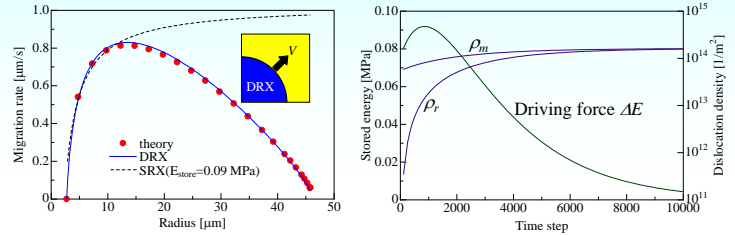
## 初期粒サイズの影響評価



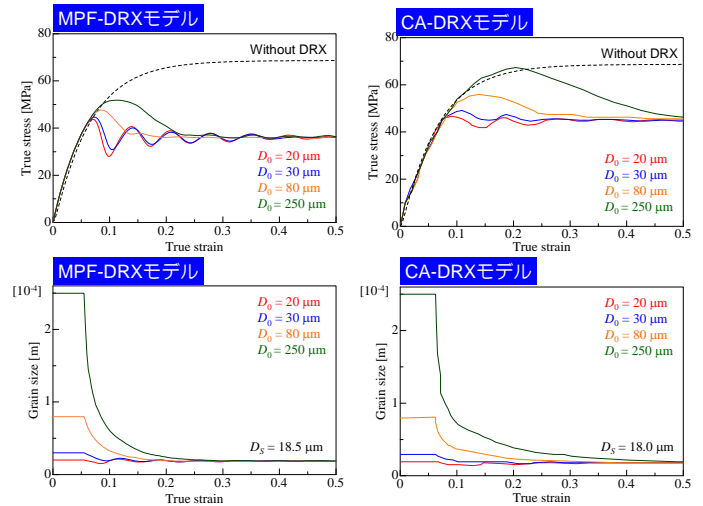
## 結言

- 変形と回復による転位密度発展をKMモデルにより、DRX多結晶粒成長をMPFモデルにより表現する、MPF-DRXモデルを構築した。
- 単一DRX粒成長シミュレーションを行い、粒界移動速度を理論式と比較することで、構築したモデルが高い精度で粒成長を再現できることを示した。

## 単一DRX粒成長シミュレーション



## CA法との比較



- CA法による結果と比較することにより、CA法の問題点を指摘し、PF法の有効性を強調した。
- MPFシミュレーションを効率的に解くことのできるアルゴリズムを導入し、DRXシミュレーションの高速化を可能とした。
- 初期粒径がDRX微視組織発展と巨視的応力-ひずみ関係に及ぼす影響を評価し、これらはDRXサイクルに強く依存することを示した。