

Multi-Phase-Field 法と均質化法による鉄鋼材料の力学特性予測

Prediction of Mechanical Properties of Steel using Multi-Phase-Field Method and Homogenization Method.

○ 正 山中晃徳 (神戸大・院) 正 高木知弘 (京工織大・院)
正 富田佳宏 (神戸大・院)

Akinori YAMANAKA, Graduate School of Science & Technology, Kobe University, Nada, Kobe, 657-8501
Tomohiro TAKAKI, Graduate School of Science & Technology, Kyoto Institute of Technology
Yoshihiro TOMITA, Graduate School of Engineering, Kobe University

Key Words : Multi-Phase-Field Method, Homogenization Method, Dual Phase Steel
Mechanical Property, Microstructure

数値シミュレーションによる鉄鋼材料の材質予測を実施可能とするため、Multi-Phase-Field 法と均質化法に基づく弾塑性有限要素法を用いた材質予測シミュレーション手法を構築した。本研究では、構築した材質予測手法を用いて Dual Phase(DP) 鋼の内部組織の形成予測ならびに力学特性評価を行い、DP 鋼の強度や延性にフェライト+マルテンサイト 2 相組織形態が及ぼす影響を検討した。その結果、本手法を用いることにより DP 鋼の延性を向上させるためのマルテンサイト相の体積分率や組織形態を明らかにすることができた。

1 緒言

鉄鋼材料の力学特性は、フェライト (α)、パーライト、ベイナイト、マルテンサイトの単一組織で構成される複相組織の空間分布、形態に依存して変化する。したがって、要求される力学特性を有する鉄鋼材料を創製するためには、製造工程中の様々な組織形成過程を予測し、予測された組織に基づいて力学特性評価を行う必要がある。近年では、このような材質予測を数値シミュレーションにより実現しようとする試みが数多くなされている。これに対して、著者らは Phase-Field 法と均質化法を用いた材質予測シミュレーション法を構築し、鉄鋼材料における組織予測と力学特性評価を系統的に実施可能であることを示した⁽¹⁾。本研究では、著者らが提案する材質予測手法を Multi-Phase-Field(MPF) 法による組織形成予測が可能な形式に拡張し、 α 相を母相、マルテンサイト相を第二相とする Dual Phase(DP) 鋼の材質予測シミュレーションを行い、DP 鋼の強度や伸びに DP 組織の形態が与える影響を検討する。

2 Multi-Phase-Field 法

本研究における DP 鋼の材質予測シミュレーションは、MPF 法による熱処理シミュレーションおよび均質化法による引張り変形シミュレーションで構成される。熱処理シミュレーションでは、連続冷却過程における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による α 相の体積分率の変化、空間分布を予測する。ついで、引張り変形シミュレーションでは、熱処理シミュレーションで予測された α 相を母相とする DP 鋼の引張り変形解析を行い、DP 鋼の巨視的応力ひずみ関係ならびに組織内部の微視的な応力、ひずみ場を評価する。以下では、熱処理シミュレーションで用いる、多結晶 γ 相における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の MPF モデルを説明する⁽²⁾。

組織発展を記述するために、系の全自由エネルギーを評価する。MPF 法において系の全自由エネルギーは、化学的自由エネルギーと勾配エネルギーの和で表され、次式の

Gibbs の自由エネルギー汎関数で定義する。

$$G = \int_V \left[\sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \left(-\frac{a_{ij}^2}{2} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j + W_{ij} \phi_i \phi_j \right) + g_e \right] dV \quad (1)$$

ここで、 ϕ_i ($i = 1, 2, 3, \dots, N$) は、多結晶体を構成する N 個の粒のうち、ある i 番目の粒 (以後、粒 i と呼ぶ) の存在確率を表す秩序変数であり、粒 i 内では $\phi_i = 1$ 、それ以外の粒では $\phi_i = 0$ の値である。また、 $0 \leq \phi_i \leq 1$ の領域が界面を表す。このとき、 ϕ_i はそれぞれ独立な変数でなく、任意点で $\sum_{i=1}^N \phi_i = 1$ を満足する必要がある。

全自由エネルギー G が組織発展とともに減少することを仮定すると、 ϕ_i の時間発展は、次式で表される。

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

さらに、本モデルでは $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態に伴う炭素濃度の変化を解析するため、各粒内の炭素濃度を表す局所濃度 C_i を定義し、炭素濃度 C が phase field ϕ_i と局所濃度 C_i の線形関数、 $C = \phi_1 C_1 + \phi_2 C_2 + \phi_3 C_3 + \dots + \phi_N C_N$ で表されるものとする。そして、炭素拡散方程式は炭素原子の拡散流束 J が各粒における拡散流束 J_i と phase field ϕ_i の線形関数として表現されると仮定し、次式で表現する。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^N \phi_i J_i \right) = \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^N \phi_i D_i^\lambda \nabla C_i \right) \quad (3)$$

ここで D_i^λ は、粒 i が λ ($\lambda = \alpha$ または γ) 相である場合の拡散係数を表し、各粒内で一定とする。

3 材質予測シミュレーション法

連続冷却過程における α 相形成を予測する熱処理シミュレーションでは、初期温度を $T_0 = 1100\text{K}$ 、冷却速度を $\Delta T = 0.5 \text{ K/s}$ とする。このとき、連続冷却開始時には α 相が多結晶 γ 相の粒界三重点に核形成した状態を仮定する。界

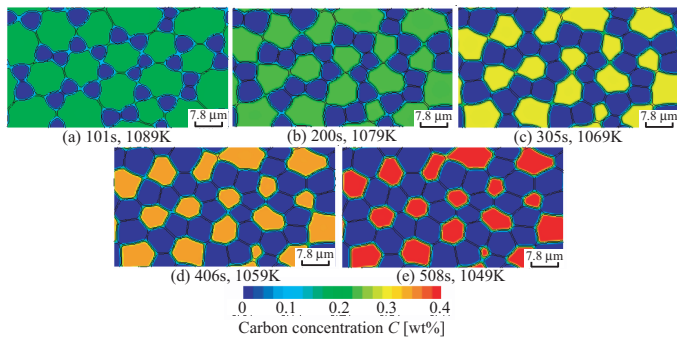


Fig. 1 Distribution of carbon concentration during CCT at a cooling rate $\Delta T = 0.5$ K/s.

面エネルギーは 0.5 J/m^2 で一定、 α と γ 両相の初期炭素濃度は T_0 における平衡炭素濃度を与えた。そして、全方向周期境界条件を適用し、時間発展方程式 (2) および (3) を差分法を用いて数値解析する。一方、DP 鋼の引張り変形シミュレーションにおいては、均質化法に基づく弾塑性有限要素法 (3) を用いて、巨視的ひずみ速度 $\dot{E} = 10^{-3} / \text{s}$ の引張り変形解析を行い、熱処理シミュレーションにおいて予測される α 相形態に依存した DP 鋼の力学特性を評価する。DP 鋼の内部組織を表現する代表体積要素 (RVE) は、熱処理シミュレーションによって得られる組織の画像データをもとに、画像処理により作成する (4)。

4 シミュレーション結果および考察

図 1 に、熱処理シミュレーションで得られた α 相形成過程を炭素濃度で示す。時間の経過とともに温度が低下し、 γ 相へ炭素原子を拡散させながら α 粒が成長していることがわかる。しかしながら、406 s 以降は α 粒同士の衝突と γ 相内の炭素濃度増加による変態駆動力の減少のため、 α 相の成長が抑制されている様子が観察できる。このように、MPF 法を用いて多結晶 γ 相における α 相の形成予測を行うことで、DP 鋼の母相となる α 相の体積分率、組織内の炭素濃度分布、さらには $\alpha + \gamma$ 2 相組織の形態を予測することができる。以下では、図 1(a)~(e) の各 α 相を内部に有する DP 鋼の引張り変形解析の結果を示すが、このとき未変態の γ 相は引張り変形前の焼き入れによってマルテンサイト相に変化すると仮定し、各 DP 鋼内のマルテンサイト相体積分率 V_m を算出した。

図 2(a) に、 $V_m = 24 \sim 63\%$ の DP 鋼の引張り変形解析で得られた巨視的な真応力-真ひずみ曲線を示す。図中には比較のため α 単相鋼とマルテンサイト単相鋼の真応力-真ひずみ曲線も示した。この結果より、第二相である硬質なマルテンサイト相の体積分率の増加に伴って、マルテンサイト単相材の応力ひずみ曲線に近づき、変形抵抗が増大していることがわかる。次に、 V_m の変化が DP 鋼の伸びに及ぼす影響を検討するため、図 2(a) の真応力-真ひずみ曲線より算出した n 値と V_m の関係を図 2(b) に示す。 n 値が高い材料ほど大きな均一伸びが得られるが、本解析においては Hüper ら (5) の解析結果と同様に V_m の増加に伴い、 n 値も単調に増加する傾向を示した。この原因を明らかにするため、図 3 に巨視的公称ひずみ $E_n =$

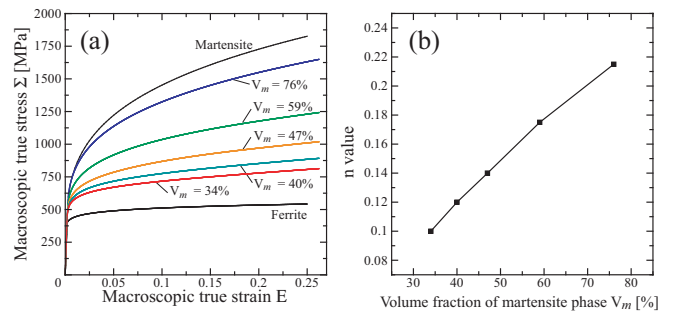


Fig. 2 (a) Macroscopic true stress - true strain curves for different volume fractions of martensitic phase. (b) Relationship between n value and volume fraction of martensitic phase.

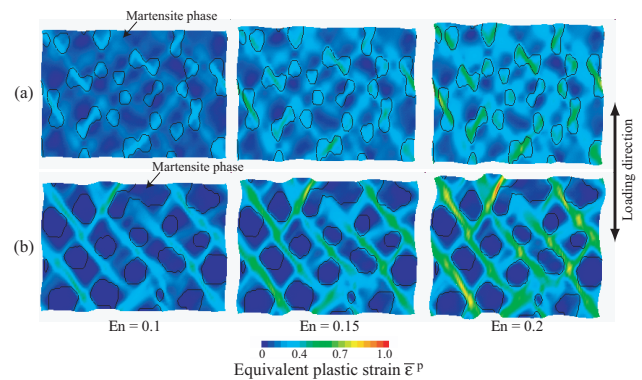


Fig. 3 Evolution of equivalent plastic strain during tensile deformation of DP steel with volume fraction of martensitic phase (a) $V_m = 76\%$ and (b) $V_m = 34\%$.

0.1, 0.15, 0.2 における $V_m = 76\%$ および 34% の DP 鋼 (以後、DP-76%鋼、DP-34%鋼と記す) の組織内の相当塑性ひずみ分布を示す。DP-76%鋼では軟質な α 相が少ないためマルテンサイト相においても塑性変形が生じているが、DP-34%鋼においてはマルテンサイト相はほとんど塑性変形せず、マルテンサイト相に挟まれた α 相において大きな塑性ひずみの集中が生じていることがわかる。この結果より、石川ら (6) が DP 鋼では軟質相と硬質相の界面近傍で大きな塑性ひずみ集中が生じた領域が増加するほど、 n 値が向上すると報告しているように、本研究においても V_m の増加に伴ってマルテンサイト相近傍の α 相で塑性ひずみが集中する領域が多くなり、 n 値が増加したと考えられる。講演会当日は、ここで述べた V_m と n 値の関係のみならず降伏比や均一伸びを向上させるための組織形態について報告する。

5 参考文献

- (1) A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita, *Materials Science and Engineering A*, **480** (2008), 244-252.
- (2) A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita, *Journal of Crystal Growth*, **310** (2008), 1337-1342.
- (3) 比嘉, 富田, 日本機械学会論文集 A 編, **66** (2000) 1441-1446.
- (4) S. J. Hollister, J. M. Brennan, N. Kikuchi, *Journal of Biomechanics*, **91** (1994), 433-444.
- (5) T. Hüper, S. Endo, N. Ishikawa, K. Osawa, *ISIJ International*, **39** (1999), 288-294.
- (6) 石川, 末吉, 遠藤, 鹿内, 鉄と鋼, **91** (2005), 809-815.