

MPF-DRX モデルによる熱間加工過程の 微視組織発展と力学的特性予測

京都工芸繊維大学 ○高木知弘 神戸大学 富田佳宏

Estimates of Microstructure Evolutions and Mechanical Behaviors during Hot Working using MPF-DRX model

Tomohiro TAKAKI and Yoshihiro TOMITA

1. はじめに

低中積層欠陥エネルギーを有する金属材料を熱間で加工すると、変形による転位の蓄積とその転位を駆動力とする再結晶粒の生成および成長が生じる。この現象は、冷間加工後の焼きなまし時に生じる静的再結晶(Static recrystallization : SRX)に対して動的再結晶(Dynamic recrystallization : DRX)と呼ばれている。上記のように DRX は転位の蓄積による硬化と、再結晶による軟化が同時に生じる高温環境下における極めて複雑な現象であるため、実験によるその場観察や数値モデルの構築が SRX ほど進んでいないのが現状である。

著者らのグループでは、多結晶体の粒成長挙動を精度良く評価可能な Multi-phase-field (MPF) 法と Kocks-Meching (KM) モデルによる転位発展モデルを用いることで、DRX 過程の微視組織発展とマクロな応力-ひずみ関係を評価可能な数値モデル(MPF-DRX モデル)の構築を行った¹⁾。また、本手法が cellular automaton (CA)法²⁾に比べて精度の高い評価が可能であることを示した¹⁾。本研究では、MPF-DRX モデルに対して DRX 過程のトポロジカルな変形を再現できる数値シミュレーション手法を導入し、変形を考慮することによる微視組織発展およびマクロな応力-ひずみ関係におよぼす影響を考察する。さらに、DRX サイクルという概念を導入し、マクロな応力-ひずみ関係が初期粒サイズに依存して単一ピーク曲線から複数ピーク曲線に移行する現象を考察する。

2. MPF-DRX モデル

2・1 Multi-phase-field 法 再結晶粒の成長は Steinbach らによって提案された MPF 法によりシミュレートする³⁾。本モデルでは phase field ϕ_i は i 番目の粒内で 1, 他粒内で 0, 粒界で $0 < \phi_i < 1$ の値をとる。Phase field ϕ の時間発展方程式は次式のように表される。

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

ここで、勾配係数 a_{ij} , エネルギー障壁 W_{ij} , phase field モビリティ M_{ij}^{ϕ} は次式により粒界エネルギー γ_{ij} , 界面幅 δ , 粒界モビリティ M_{ij} と関係付けることができる。

$$a_{ij} = \frac{2}{\pi}\sqrt{2\delta\gamma_{ij}}, \quad W_{ij} = \frac{4\gamma_{ij}}{\delta}, \quad M_{ij}^{\phi} = \frac{\pi^2}{8\delta}M_{ij} \quad (2)$$

式(1)中 ΔE_{ij} は再結晶粒成長の駆動力であり、隣接する粒間の蓄積エネルギーとなる。

式(1)の時間発展方程式を Kim ら⁴⁾が提案したアルゴリズムを用いて解くことにより、多くの粒を用いても効率的な粒

成長シミュレーションを行うことが可能となる。

2・2 転位密度発展モデル MPF-DRX モデルでは変形場は直接解かず、次式で表される KM モデルにより転位密度を発展させる。

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon} = k_1\sqrt{\rho} - k_2\rho \quad (3)$$

ここで、右辺第一項は転位蓄積による硬化項、第二項は動的回復項である。

微視組織発展に依存するマクロな応力は次式の Bailey-Hirsch の式を用いて解析領域の平均転位密度 ρ_{ave} から算出することができる。

$$\sigma = \alpha\mu b\sqrt{\rho_{ave}} \quad (4)$$

2・3 解析手順 MPF-DRX 解析手順は次の通りである。

- ① 解析領域内の転位密度を一定 $\rho = \rho_0$ とする。
- ② 式(3)の KM モデルによりひずみ増分 $\Delta\varepsilon$ に対する転位密度増分 $\Delta\rho$ から転位密度 ρ を計算する。
- ③ 粒界上の転位密度が核生成臨界値に達したら核生成速度に応じて再結晶核を配置する。その際、核内の転位密度は初期値 $\rho = \rho_0$ とする。
- ④ MPF により再結晶粒成長をシミュレートする。粒成長の駆動力は隣合う粒の蓄積エネルギー差である。
- ⑤ 解析領域内の平均転位密度から式(4)の Bailey-Hirsch の式を用いてマクロな応力-ひずみ曲線を導出する。

3. 数値シミュレーション

3・1 変形の考慮 これまでの DRX シミュレーションでは、大きな塑性変形を受けているにも関わらず、解析領域は初期形状一定とされてきた。最近、DRX 過程の粒変形を擬似的に考慮する CA モデルが提案され、変形を考慮しない場合とする場合とで結果が異なることが示された⁵⁾。ここでは、MPF-DRX モデルを用いて粒形状の変形を考慮可能な数値シミュレーションを構築し、変形の影響を考察する。

粒変形は差分格子間隔を変形ひずみ速度に対応して変化させることにより生じさせる。差分格子の非正方形性の粒成長に及ぼす影響を確認するために、図1左図に示すような $\Delta x : \Delta y = 1.0 : 1.3$ の差分格子を用い、単一再結晶粒を成長させる際の x, y 方向の速度変化を見る。シミュレーション結果を図1右図に示している。両方向へ成長する粒界面の移動速度は完全に一致しており、差分格子のアスペクト比 1.3 以下では十分な精度が達成できることが分かる。

図2は DRX 過程においての解析領域一定の状態と変形を考慮した場合の微視組織発展を示している。初期粒径 D_0 は $250 \mu\text{m}$ と比較的大きな粒を対象としており、典型的なネック

レス構造を確認することができる。変形を考慮する場合としない場合とでは、初期粒の形状が明確に異なることが分かる。しかしながら、再結晶分率は同じでありマクロな応力-ひずみ関係も全く同じ曲線となった。これは CA 法による前報⁵⁾と異なる結果であり、CA 法が適切に再結晶粒成長過程をシミュレートできていないことを指摘している。さらに本結果より、マクロな応力-ひずみ関係を評価する場合は、変形を考慮する必要が無いことが結論付けられる。

3・2 DRX サイクル DRX では一旦再結晶した領域も継続的な変形により転位密度が増加するため、再結晶領域を区別することは困難である。そこで、DRX サイクルという概念を導入し、各 DRX サイクル分率変化とマクロな応力-ひずみ曲線の関係を考察する。図 3 は応力-ひずみ関係と DRX サイクル分率変化の関係を示している。応力-ひずみ関係が複数ピークを示す $D_0 = 30 \mu\text{m}$ では、変形初期において 3 つ以上の DRX サイクルが重ならないことが分かる。一方 $D_0 = 80, 250 \mu\text{m}$ の結果では初期から 3 つ以上の DRX サイクルが重な

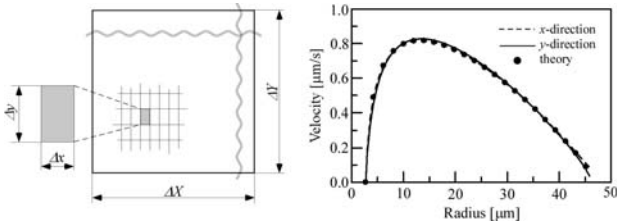


Fig.1 Shape of finite difference lattice and grain boundary velocities during single DRX grain growth

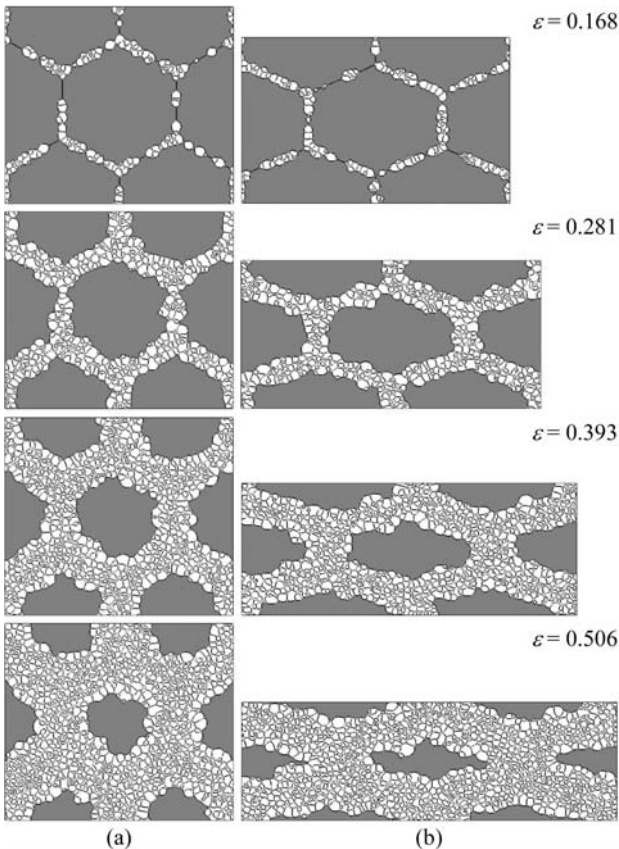


Fig.2 DRX microstructure evolutions (a) without and (b) with deformation ($D_0 = 250 \mu\text{m}$)

っており、マクロな応力-ひずみ曲線の複数ピークから単一ピークへの移行が今回導入した DRX サイクルと密接に関係していることがわかる。図 4 は DRX サイクル分率のピーク点を初期粒サイズを変えて算出した結果である。いずれもほぼ一定値に収束していることが分かる。

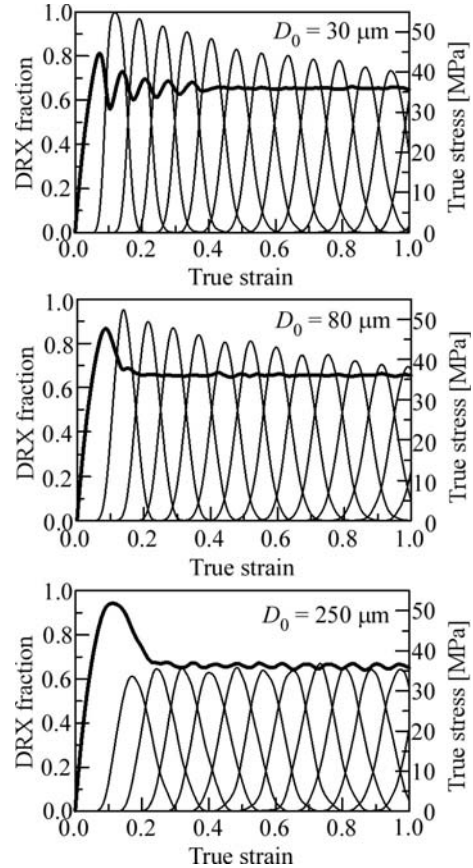


Fig.3 Stress-strain curves and fraction of DRX cycles

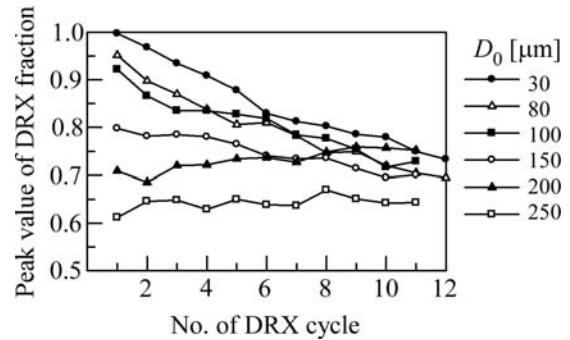


Fig.4 Variations in peak value of DRX cycle fraction

参考文献

- 1) T. Takaki, T. Hirouchi, Y. Hisakuni, A. Yamanaka, Y. Tomita, Mater. Trans., (2008). in press.
- 2) G. Kugler, R. Turk, Acta Mater., 52, 4659 (2004).
- 3) I. Steinbach, F. Pezzolla, Physica D, 134, 385 (1999).
- 4) S. G. Kim, D. I. Kim, W. T. Kim, Y. B. Park, Phys. Rev. E, 74, 061605 (2006).
- 5) N. Xiao, C. Zheng, D. Li, Y. Li, Comp. Mater. Sci., 41, 366 (2008)