

Phase-field 法と結晶塑性論による再結晶組織予測の高精度化の検討

Examination of High Accuracy Modeling of Recrystallization Using Phase-Field Method and Crystal Plasticity Theory

高木 知弘

京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科

Tomohiro TAKAKI

Graduate School of Science and Technology,
Kyoto Institute of Technology

富田 佳宏

神戸大学大学院工学研究科

Yoshihiro TOMITA

Graduate School of Engineering, Kobe University

Key Words: Static Recrystallization, Subgrain Growth Model, Phase-Field Method, Crystal Plasticity

再結晶組織発展をシミュレートするモデルとして、蓄積エネルギーを駆動力とする数値モデルと、サブグレイン組織の粒界エネルギーのバランスで組織発展を表現する数値モデルがある。前者は核生成条件を設定する必要があるが、後者は異常粒成長に基づく自発的な核生成を表現することができる。本研究では、結晶塑性解析結果から変形時のサブグレイン組織予測を行い、それを初期構造とする統合的サブグレイン成長モデルによる再結晶組織予測シミュレーションモデルの構築を行う。また、変形量が異なる再結晶シミュレーションを行い、再結晶組織発展におよぼす影響を考察する。

1. はじめに

再結晶組織は変形組織に強く影響を受けることは広く知られている⁽¹⁾。しかしながら、変形組織と再結晶組織を連続してシミュレートするモデルはあまり多く発表されていないようである⁽²⁻⁴⁾。

Raabe らは⁽²⁾、結晶塑性有限要素(CP-FE)法により変形状態を計算し、その結果を cellular automaton (CA)法のセルにマッピングし、再結晶組織発展をシミュレートしている。Takaki ら⁽³⁾は、同様の手法を phase-field (PF)法を用いて構築している。これらの CA 法、PF 法では、CP-FE 解析より計算される蓄積エネルギーを駆動力とし、さらに仮定した核生成条件に基づき、再結晶粒の生成・成長シミュレーションを行っている。このため、結果が仮定した核生成条件に左右され、今後適切な核生成モデルの構築が必要不可欠である。Radhakrishnan ら⁽⁴⁾は、変形組織を同様に CP-FE 法により求め、そのデータを用いて変形サブグレイン構造を予測し、Monte Carlo (MC)法によるサブグレイン成長シミュレーションにより再結晶組織発展を再現している。本手法では、サブグレイン組織予測時に大きな仮定を置いているが、核生成モデルを仮定する必要無く変形組織に依存した自発的な核生成を表現可能としている。

本研究では、Radhakrishnan ら⁽⁴⁾のモデルにおいて変形サブグレイン組織予測をより高精度に行い、さらに粒成長を精度良く再現できる phase-field 法を用い、精度の高い静的再結晶シミュレーションを可能とすることを目的としている。

2. サブグレイン成長モデル

2-1 サブグレイン組織予測 EBSD 法などによる組織観察から蓄積エネルギー E_{store} を算出する際、

$$E_{store} = \frac{K\gamma_s}{D_s} \quad (1)$$

が良く用いられる。ここで、 γ_s は粒界エネルギー、 D_s はサブグレイン直径、 K は定数である。式(1)に Read-Shockley の関係

$$\gamma_s = \gamma_m \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_m} \left(1 - \ln \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_m}\right) \quad (2)$$

を考慮すると、

$$D_s = \frac{K}{E_{store}} \gamma_s = \frac{K}{E_{store}} \gamma_m \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_m} \left(1 - \ln \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_m}\right) \quad (3)$$

を得ることができる。蓄積エネルギー E_{store} は結晶塑性解析から算出される転位密度 ρ を用いて次式により計算することができる。

$$E_{store} = \frac{1}{2} \rho \mu b^2 \quad (4)$$

ここで、 μ はせん断弾性係数、 b はバーガースベクトルの大きさである。さらに、サブグレイン直径 D_s と結晶方位差 $\Delta\theta$ との関係として $\Delta\theta = |\nabla\theta|D_s$ を仮定すると、式(3)より、

$$\Delta\theta = \Delta\theta_m \exp \left[1 - 1 / \left\{ |\nabla\theta| \frac{K}{E_{store}} \frac{\gamma_m}{\Delta\theta_m} \right\} \right] \quad (5)$$

を得ることができる。ここで、 $|\nabla\theta|$ は局所的な結晶方位勾配である。

式(5)より、結晶塑性解析から導出される E_{store} と $|\nabla\theta|$ により局所的な方位差 $\Delta\theta$ を算出すると式(3)よりサブグレイン直径 D_s が得られる。これらの情報を元に、PF法による通常粒成長シミュレーションを行うことで、サブグレイン構造を作成する。

2-2 Multi-phase-field 法 粒成長シミュレーションには、Steinbach ら⁽⁵⁾の Multi-phase-field (MPF)モデルを用いる。本モデルはパラメータと物性値の関係付けが容易で定量的な粒成長シミュレーションが可能であり、Kim ら⁽⁶⁾のアルゴリズムを用いることでシミュレーションを効率的に行うことができる。

文献[5]によると、粒 i 内で1、他粒内で0、粒界で $0 < \phi_k < 1$ の値をとる phase field ϕ_k の時間発展方程式は、次式で与えられる。

$$\dot{\phi}_i = -\sum_{j=1}^n \frac{2M_{ij}^\phi}{n} \left[\sum_{k=1}^n \left\{ (W_{ik} - W_{jk}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{jk}^2) \nabla^2 \phi_k \right\} \right] \quad (6)$$

ここで、 n は $\phi_k > 0$ の phase field の数であり、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。

$$a_{ij} = \frac{2}{\pi} \sqrt{2\delta\gamma_{ij}}, W_{ij} = \frac{4\gamma_{ij}}{\delta}, M_{ij}^{\phi} = \frac{\pi^2}{8\delta} M_{ij} \quad (7)$$

粒界エネルギーの方位差依存性は式(2)により、粒界モビリティの方位差依存性は次式により表される。

$$M_{ij}(\Delta\theta_{ij}) = M_m \left[1 - \exp \left\{ -5 \left(\frac{\Delta\theta_{ij}}{\Delta\theta_m} \right)^4 \right\} \right] \quad (8)$$

3. シミュレーション結果

ひずみ勾配理論を用いた CP-FE 法により、初期平均粒径 $D_0 = 115.5 \mu\text{m}$ の六角形定形粒多結晶構造の圧縮シミュレーションを行う⁽⁷⁾。この結果に基づき、変形サブグレイン組織を予測した結果を図 1 に示す。

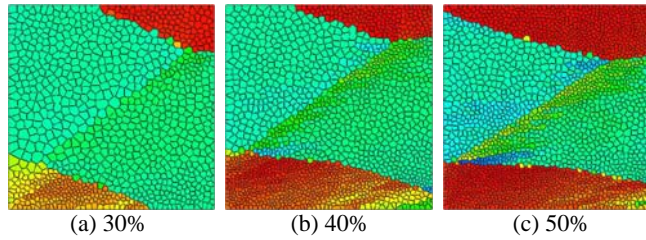


Fig. 1 Predicted deformation microstructures

図 1 の(a)(b)(c)は、それぞれ 30, 40, 50% 圧縮変形させた場合の結果である。カラーは結晶方位、黒い実線は粒界を示している。いずれも 4 つの初期粒を含む $80 \times 80 \mu\text{m}$ のほぼ同じ領域を 800×800 の差分格子で分割している。サブグレインの数は、(a) 1052, (b) 1799, (c) 2229 である。変形が大きくなるに伴い、サブグレインサイズが小さくなっていることが分かる。また、変形は粒界近傍に集中しやすいため、(b)(c)においては解析領域中心の粒界近傍で細かいサブグレインが観察される。領域上下の粒では、粒内において変形が大きくなるため、粒内においても細かいサブグレインが形成されている。以上のように、変形量を的確に反映したサブグレイン構造の生成を確認することができる。

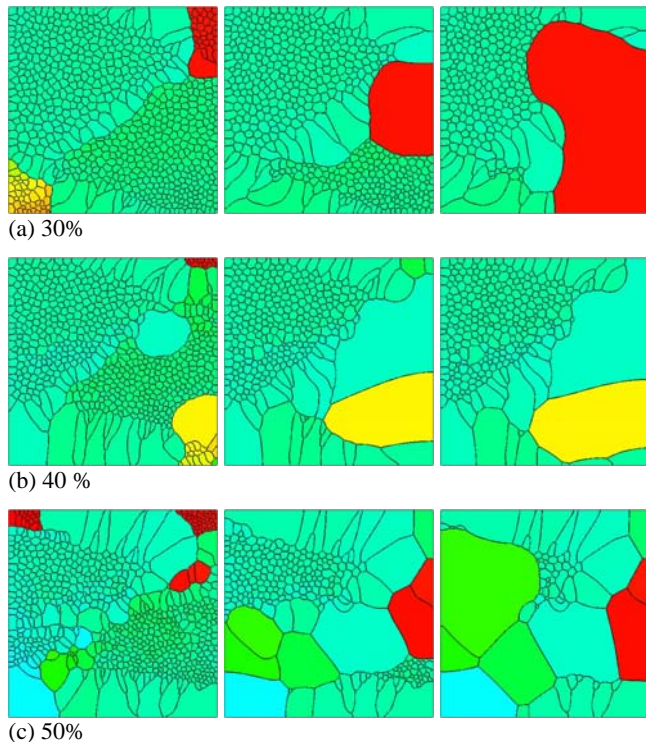


Fig. 2 Microstructure evolutions during recrystallization

図 2 は図 1 から再結晶 PF シミュレーションを行った際の微視組織の発展を示している。いずれも、左から 60000, 180000, 300000 ステップの結果である。ここで、時間増分を $\Delta t = 0.05 \text{ s}$ としている。解析初期において、(a)(b)では初期粒界近傍のサブグレインが優先的に成長しているが、変形量の大きい(c)では初期粒内においてもサブグレインの成長が確認できる。図 1 より、解析領域内の上下の粒は変形が大きく、エネルギーが高い状態にあるため、再結晶が早く進行している。また図 2(a)(b)では、ある特定の粒が途中から大きく成長しており、変形量が大きいほど異常成長する粒の数が増えていることがわかる。(c)では再結晶核が多く生成されるため、(a)(b)に比べると比較的等軸状の再結晶粒が形成されている。さらに、中央左側の粒は変形量が少なく、初期のサブグレインサイズが大きいため、再結晶が遅くなっている。

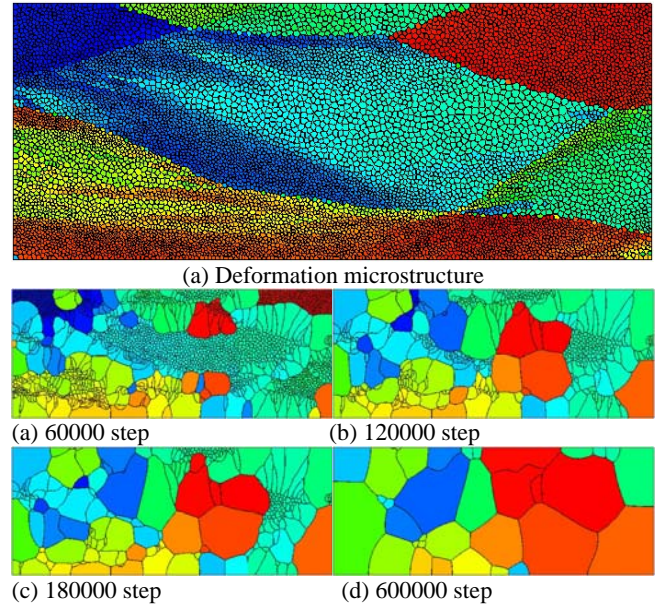


Fig. 3 Microstructure evolutions for large computational domain

図 3 は $250 \times 100 \mu\text{m}$ の領域を再結晶シミュレーションの領域とした結果である。50% 圧縮変形したものを対象としており、図 1 と 2 の(c)は図 3 の領域内の右の方に対応する。 2500×1000 の差分格子を用いており、初期のサブグレイン数は 9622 である。図 3 より、初期粒界に加え粒内の変形が大きいサブグレインの小さい領域が再結晶粒の核生成サイトとなり、大きな粒が成長していることが分かる。特に、左下の粒内では多くの核生成が生じている。中央の粒は変形量が小さくサブグレインサイズが大きいため、再結晶速度が遅いことが分かる。しかしながら、時間の経過に伴いサブグレインは大きな再結晶粒に飲み込まれ、最終的に粗大な再結晶組織が形成されている。

参考文献

- (1) F.J. Humphreys and M. Hatherly, Recrystallization and Related Annealing Phenomena, Elsevier, (2004).
- (2) D. Raabe and R. C. Becker, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., 8 (2000) 445.
- (3) T. Takaki, A. Yamanaka, Y. Higa and Y. Tomita, J. Comp.-Aid. Mat. Des., 14 (2007), 75.
- (4) B. Radhakrishnan, G. Sarma, H. Weiland and P. Baggethun, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., 8 (2000) 737.
- (5) I. Steinbach and F. Pezzolla, Physica D, 134 (1999), 385.
- (6) S. G. Kim, D. I. Kim, W. T. Kim and Y. B. Park, Phys. Rev. E, 74 (2006), 061605.
- (7) 高木知弘, 山中晃徳, 比嘉吉一, 富田佳宏, 機論 A, 73 (2007), 482.