

# 弾塑性 Phase-Field モデルによる相変態シミュレーション

## Simulation of Phase Transformation using Elastoplastic Phase-Field Model

○ 山中晃徳・神戸大院

Akinori YAMANAKA,  
Graduate School of Science and  
Technology,  
Kobe University

高木知弘・京工繊大院

Tomohiro TAKAKI,  
Graduate School of Science and  
Technology,  
Kyoto Institute of Technology

富田佳宏・神戸大院

Yoshihiro TOMITA,  
Graduate School of Engineering,  
Kobe University

**Key Words** : Elastoplastic Phase-Field Model, Phase Transformation, Plastic Deformation  
Strain Hardening, Microstructure Evolution

### 1 緒言

相変態による変態ひずみや格子ミスフィットが生じると、組織内部に応力場が生じる。材料内部の組織形態は、このような応力場に大きく特徴づけられるため、相変態による組織形成過程を精度良く予測するためには、相変態に伴う応力場や弾性ひずみエネルギーの変化を正確に評価しなければならない。鉄鋼材料におけるマルテンサイト ( $\alpha'$ ) 変態では、Bain の格子変形に起因して弾塑性変形が生じ、応力場を緩和する過程で様々な  $\alpha'$  組織が形成される<sup>(1)</sup>。これまでに著者らは、 $\alpha'$  変態における組織形成過程ならびにそれに伴う弾塑性変形を表現可能な弾塑性 Phase-Field(PF) モデルを構築し、 $\alpha'$  変態中の塑性変形が  $\alpha'$  組織形態に及ぼす影響を明らかにした<sup>(2)</sup>。しかしながら、前報の弾塑性 PF モデルは、加工硬化挙動を表現することができなかった。そこで本研究では、 $\alpha'$  変態などの相変態における組織形成過程と加工硬化を生じる弾塑性変形を表現可能な PF モデルを構築する。本稿では、新たに構築した弾塑性 PF モデルを用いて、硬質相と軟質相からなる 2 相材料の引張り変形解析を行い、加工硬化を生じる弾塑性変形挙動を評価する。

### 2 弾塑性 Phase-Field モデル

2 相材料の引張り変形解析に用いる、弾塑性 PF モデルを説明する。本研究では、硬質相および軟質相ともに弾塑性体であり、両相の弾性変形および弾塑性変形における応力速度  $\dot{\sigma}_{ij}$  は、それぞれ Hooke の法則および Prandtl-Reuss の式により次式で表されるものとする。

$$\dot{\sigma}_{ij} = D_{ijkl}^e \dot{\epsilon}_{kl}^c \quad \text{for elastic deformation} \quad (1)$$

$$\dot{\sigma}_{ij} = D_{ijkl}^p \dot{\epsilon}_{kl}^c \quad \text{for elastoplastic deformation} \quad (2)$$

ここで、 $D_{ijkl}^e$  は弾性係数マトリクスであり、 $D_{ijkl}^p$  は  $D_{ijkl}^p = D_{ijkl}^e - \Delta D_{ijkl}$  の関係で記述されるものとする。また、 $\dot{\epsilon}_{ij}^c$  は全ひずみ速度であり、均一ひずみ速度  $\dot{\epsilon}_{ij}^c$  および変動ひずみ速度  $\delta \dot{\epsilon}_{ij}^c$  の和で表される<sup>(3)</sup>。ここで、塑性変形領域を弾性変形領域よりも  $\Delta D_{ijkl}$  だけ弾性係数の異なる介在物とみなし、Eshelby の等価介在物理論<sup>(4)</sup> を適用すると、式 (2) で表される応力速度は弾性変形領域と同じ弾性係数マトリクス  $D_{ijkl}^e$  を用いて評価することができ、固有ひずみ速度  $\dot{\epsilon}_{ij}^0$  を用いて、次式で表される。

$$\dot{\sigma}_{ij} = D_{ijkl}^e (\dot{\epsilon}_{kl}^c + \delta \dot{\epsilon}_{kl}^c - \dot{\epsilon}_{kl}^0) \quad (3)$$

ここで、均一ひずみ速度  $\dot{\epsilon}_{ij}^c$  は境界条件から、変動ひずみ速度  $\delta \dot{\epsilon}_{ij}^c$  は平衡方程式をフーリエ変換 (FT) を用いて解くことにより、それぞれ次式で与えられる。

$$\dot{\epsilon}_{ij}^c = \dot{\epsilon}_{ij}^0 - \dot{\epsilon}_{ij}^a \quad (4)$$

$$\delta \dot{\epsilon}_{ij}^c = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_k \frac{(n_j \Omega_{mi} + n_i \Omega_{mj})}{2} n_n \dot{\sigma}_{mn}^0 e^{-ik \cdot x} dk \quad (5)$$

ここで、 $\dot{\epsilon}_{ij}^0$  は固有ひずみ速度の空間平均値、 $\dot{\epsilon}_{ij}^a$  は付加ひずみ速度、 $n_i$  は逆空間の単位法線ベクトル、 $\Omega_{ij}$  はグリーン関数テンソル、 $\dot{\sigma}_{ij}^0$  は  $\dot{\sigma}_{ij}^0 = D_{ijkl}^e \dot{\epsilon}_{kl}^0$  の FT である。

また、式 (3) 中の固有ひずみ速度  $\dot{\epsilon}_{ij}^0$  は次式の時間依存型の Ginzburg-Landau 方程式を用いて求めることができる<sup>(5)</sup>。

$$\frac{\partial \epsilon_{ij}^0}{\partial t} = -L_{ijkl} \frac{\delta G_{el}}{\delta \epsilon_{kl}^0} \quad (6)$$

ここで、 $L_{ijkl}$  は正の定数  $L$  を用いて、 $L_{ijkl} = L \delta_{ij} \delta_{kl}$  で表す。また、 $G_{el}$  は弾性ひずみエネルギーであり、 $\Delta D_{ijkl}^{-1}$  を用いて、次式で表される<sup>(6)</sup>。

$$G_{el} = \frac{1}{2} \int_V D_{ijkl}^e (\epsilon_{kl}^c - \epsilon_{kl}^0) (\epsilon_{ij}^c - \epsilon_{ij}^0) + \frac{1}{2} \int_V (D_{ijmnpq}^e \Delta S_{mnpq} - D_{ijkl}^e) \epsilon_{kl}^0 \epsilon_{ij}^0 \quad (7)$$

そして、弾塑性変形領域における塑性ひずみの発展は、式 (3)~式 (7) により得られる応力速度  $\dot{\sigma}_{ij}$  を用いて、次式で表現する。

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \frac{9\sigma'_{kl} \dot{\sigma}_{kl}}{2\bar{\sigma}^2 H'} \sigma'_{ij} \quad (8)$$

ここで、 $\bar{\sigma}$ 、 $\sigma'_{ij}$ 、 $H'$  は、それぞれ相当応力、偏差応力および塑性の接線係数である。ただし、式 (6) と式 (8) は Mises の降伏条件  $F_y = \bar{\sigma} - \sigma_y \geq 0$  を満たした領域のみで解く。

### 3 解析モデル

図 1 に 2 相材料の引張り変形解析に用いる解析モデルを示す。解析領域は、一辺  $L_0 = 30 \mu\text{m}$  の正方形領域であり、 $64 \times 64$  の規則格子で分割する。本研究では母相が軟質相で第二相が硬質相であるモデル 1 と、母相が硬質相で第二相が軟質相であるモデル 2 を考え、両モデルともに解析領域の中央に直径  $d = 9.4 \mu\text{m}$  の円形の第二相を配置する。そして、付加ひずみ速度  $\dot{\epsilon}_{22}^a = 10^{-3}/\text{s}$  の引張り変形を与える。また、2 次元平面ひずみ状態を仮定し、全方向周期境界条件のもと、式 (6) の時間発展方程式を差分法を用いて数値解析する。

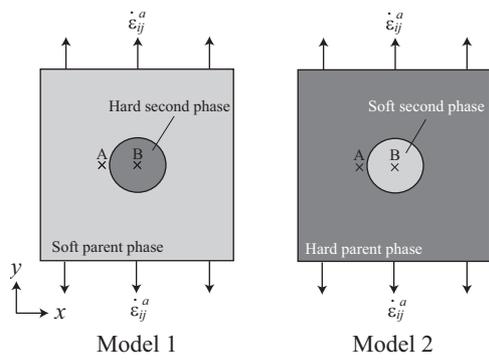


Fig. 1 Computational models.

両相の弾性係数は等しく、 $C_{11} = 140.4$ ,  $C_{44} = 56.4$ ,  $C_{12} = 84.0$  GPa を用い、弾塑性変形における各単相の応力-ひずみ関係は、次式で与える。

$$\sigma = \sigma_y \left( \frac{\epsilon}{\epsilon_y} \right)^{\frac{1}{n}} \quad (9)$$

ここで、 $1/n$  は加工硬化指数であり、軟質相と硬質相でそれぞれ  $n = 8, 12$ , 降伏応力  $\sigma_y$  は硬質相で 130 MPa, 軟質相で 100 MPa とする。さらに、式 (2) の  $D_{ijkl}^p$  は Prandtl-Reuss の式より与えられるが、本研究では  $D_{ijkl}^e$  におけるヤング率  $E$  およびポアソン比  $\nu$  を、次式の相当ヤング率  $E'$  と相当ポアソン比  $\nu'$  に置き換えたもので近似表現した<sup>(7)</sup>。これより、 $\Delta D_{ijkl}$  の各成分は  $H'$  のみで表される。

$$E' = \frac{E}{1 + \frac{E}{H'}} \quad (10)$$

$$\nu' = \frac{\nu + \frac{E}{2H'}}{1 + \frac{E}{H'}} \quad (11)$$

#### 4 解析結果および考察

図 2(a), (b) に、それぞれモデル 1 とモデル 2 における第二相近傍の A 点および第二相内部の B 点の相当応力  $\bar{\sigma}$  - ひずみ  $\epsilon_{22}^e$  曲線を示す。両モデルにおいて、硬質相よりも軟質相で先に塑性変形が生じ、加工硬化していることがわかる。図 2 の (1)~(3) で示す応力-ひずみ状態における、材料内部の応力  $\sigma_{yy}$  および相当塑性ひずみ  $\bar{\epsilon}^p$  分布を図 3 と図 4 に示す。図 3 に示すように、母相が軟質なモデル 1 では、第二相近傍の母相において塑性ひずみが集中し、母相全体で大きく塑性変形が進行してから、硬質第二相で塑性変形が開始している。これに対し、図 4 からわかるように、軟質相を第二相とするモデル 2 では、軟質第二相で大きな塑性ひずみが生じた後、応力集中が生じている軟質相周囲の硬質相において塑性変形が進行していることがわかる。

以上の結果より、本研究で新たに構築した弾塑性 PF モデルを用いて、加工硬化が生じる弾塑性変形を評価可能であることが示された。なお、本稿では弾塑性変形解析のみを行い、相変態による組織発展は解析しなかった。しかしながら、前報<sup>(2)</sup>の  $\alpha'$  変態の PF モデルに、本モデルで用いた弾性ひずみエネルギー評価法を導入することにより、 $\alpha'$  変態に伴う塑性変形および加工硬化挙動を解析可能であると考えられる。

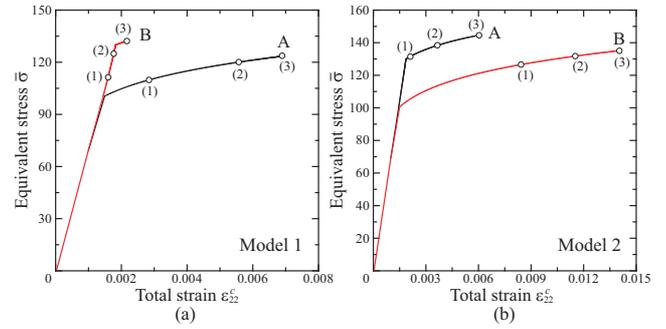


Fig. 2 Stress - strain curves at point A and B for (a) Model 1 and (b) Model 2.

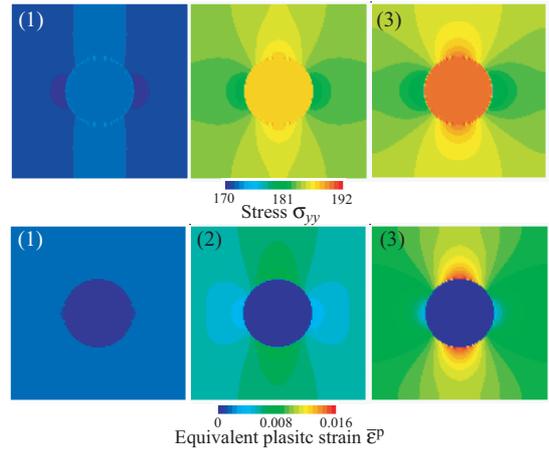


Fig. 3 Distribution of stress  $\sigma_{yy}$  and equivalent plastic strain  $\bar{\epsilon}^p$  in Model 1.

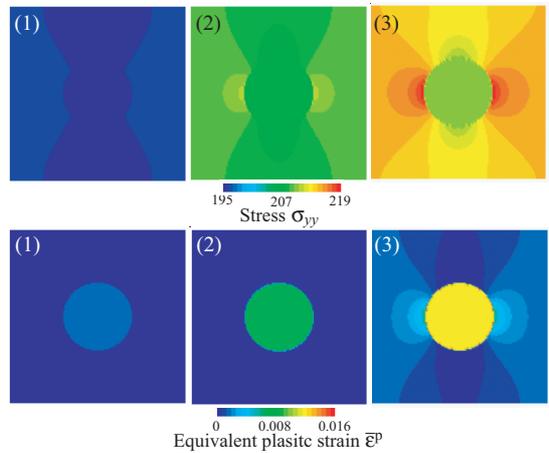


Fig. 4 Distribution of stress  $\sigma_{yy}$  and equivalent plastic strain  $\bar{\epsilon}^p$  in Model 2.

#### 5 参考文献

- (1) 高木節雄, 津崎兼彰, 材料組織学, 朝倉書店, (2000).
- (2) A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita, Materials Science and Engineering A, 491 (2008), 378-384.
- (3) A. G. Khachaturyan, Theory of Structural Phase Transformation in Solids, Wiley and Sons, New York, (1983).
- (4) J. D. Eshelby, Proceedings of the Royal Society of London. Series A, 241 (1957), 376-396.
- (5) Y. U. Wang, Y. M. Jin, A. G. Khachaturyan, Journal of Applied Physics, 91 (2002), 6435-6451.
- (6) Y. U. Wang, Y. M. Jin, A. G. Khachaturyan, Journal of Applied Physics, 92 (2002), 1351-1360.
- (7) 東郷敬一郎, T-W. Chou, 日本機械学会論文集 A 編, 61 (1995), 382-388.