

# MPF-DRX 法による熱間加工過程のマルチスケールシミュレーション

## MPF-DRX multi-scale simulation during hot working

高木知弘・京都工芸繊維大学

Tomohiro TAKAKI, Kyoto Institute of Technology

Key Words: Hot working, Multi-scale simulation, Microstructure, Phase-field method, Finite element method

### 論文要旨

熱間加工過程における塑性加工有限要素シミュレーションと微視組織発展シミュレーションを融合させることで、ミクロな組織発展に依存したマクロな熱間加工シミュレーションを可能とするマルチスケールモデルの構築を行う。本講演では、DRX-MPF法の汎用性を高めるために、ひずみ速度や温度が途中で変化する条件のシミュレーションを行えるようにモデルを拡張する。

### 1. はじめに

金属材料を再結晶温度以上の熱間で加工する場合、塑性変形による転位の蓄積に加え、転位や粒界のモビリティが高くなることに起因して回復や再結晶が生じる。このように、熱間加工では転位の蓄積による硬化と、転位の回復および再結晶粒の生成・成長による軟化が同時に生じるため、応力とひずみの関係は、初期粒サイズ、温度、ひずみ速度に依存して特徴的な曲線を呈することが知られている<sup>1)</sup>。

熱間加工の数値シミュレーションは、温度とひずみ速度の影響を代表する Zener-Hollomonp パラメータと粒サイズを、構成式に導入した有限要素法により行われている<sup>2-4)</sup>。しかしながら、これらの方法は材料組織発展を直接シミュレートしている訳ではないので、組織形態の情報を得ることはできない。

動的再結晶過程の微視組織発展シミュレーションは、cellular automata (CA) 法による粒成長と転位密度の発展式を用いたモデルが多く用いられている<sup>5, 6)</sup>。著者らは、Multi-phase-field (MPF)法を用いた動的再結晶(DRX)シミュレーションモデル、MPF-DRX 法を開発し、CA 法を用いる場合よりも高い精度で動的再結晶過程をシミュレートできることを示した<sup>7, 8)</sup>。本手法は変形を直接解かず、非常に簡単な転位密度発展式を用いているが、ミクロな組織発展に依存したマクロな応力-ひずみ関係を再現することが可能である。しかしながら、これまででは一定温度、一定ひずみ速度といった簡単な条件にしか適用されておらず、汎用性を高めるためにはモデルの更なる発展が必要である。

本研究では、熱間加工過程における塑性加工有限要素シミュレーションと微視組織発展シミュレーションを融合させることで、ミクロな組織発展に依存したマクロな熱間加工シミュレーションを可能とするマルチスケールモデルの構築を最終的な目標としている。図 1 にそのイメージを示している。有限要素毎にミクロ組織発展を MPF-DRX 法を用いて解き、そこで得られる応力-ひずみ曲線をマクロな有限要素シミュレーションに用いる。ここで計算された要素毎の温度とひずみ速度を再度ミクロ場に渡し、それらの下での組織変化をシミュレートする。この作業を繰り返すことで、マルチスケールシミュレーションが可能となる。

本講演では、DRX-MPF 法の汎用性を高めるために、ひずみ速度や温度が変化する条件にモデルを拡張し、これまで報告されている実験結果<sup>9)</sup>と比較することで、その妥当性を検討する。

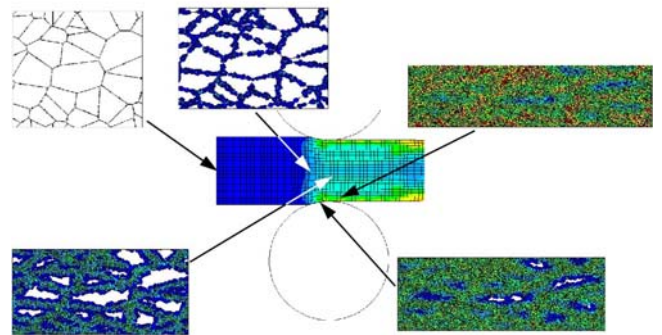


Fig.1 Image of multi-scale simulation during hot working

### 2. MPF-DRX モデル

本モデルは、MPF モデルによる再結晶粒成長、転位密度の発展式、核生成モデルから構成される。

#### 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<sup>10)</sup>。本モデルでは phase field  $\phi_i$  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  $\phi_i$  の時間発展方程式は次式のように表される。

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

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  $M_{ij}^{\phi}$  は次式により粒界エネルギー  $\gamma_{ij}$ 、界面幅  $\delta$ 、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  $\Delta E_{ij}$  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差となる。

#### 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 モデルにより各格子点毎の転位密度を進展させる。

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

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。 $k_1$  は応力-ひずみ関係の初期勾配より決定される定数、 $k_2$  は定常応力  $\sigma_s$  に反比例し温度とひずみ速度によ

り変化する。定常応力 $\sigma_s$ は次式により与えられる。

$$\sigma_s = \left[ \frac{\dot{\epsilon}}{A_0} \exp\left(\frac{Q_{act}}{RT}\right) \right]^{1/n'} \quad (4)$$

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 $\rho_{ave}$  から算出することができる。

$$\sigma = \alpha \mu b \sqrt{\rho_{ave}} \quad (5)$$

### 2-3 核生成モデル

動的再結晶粒の核生成は粒界のバルジングにより生じるとし、転位密度が臨界転位密度

$$\rho_c = \left( \frac{20\sigma\dot{\epsilon}}{3blm\tau^2} \right) \quad (6)$$

に達したときに核生成速度

$$\dot{n} = C\dot{\epsilon}^m \exp\left(-\frac{Q_{act}}{RT}\right) \quad (7)$$

で粒界上に生成するとする。

### 3. シミュレーション結果

図2は初期粒径 $D_0$ を変えた場合のマイクロ組織変化、図3はマクロな応力-ひずみ関係と粒サイズ変化である。図2の色分けは、1から12までの動的再結晶サイクルを表している<sup>8)</sup>。定常応力と定常粒サイズは初期粒径に依存せず一定になることが確認できる。また、 $D_0$ が小さくなると応力-ひずみ関係がシングルピーク曲線からマルチピーク曲線に変化している。いずれも実験結果を良く表現している。

図4は $D_0 = 25 \mu\text{m}$ モデル (480×498 FD lattice, 245  $\mu\text{m}$  × 249  $\mu\text{m}$ ) において、ひずみ速度を変化させた場合のマイクロ組織、図5は応力-ひずみ関係と粒サイズ変化である。また、

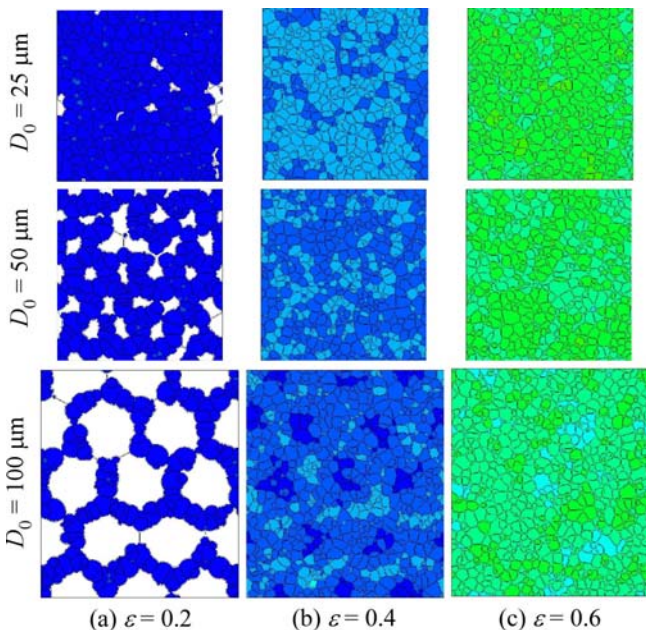


Fig.2 Microstructure evolutions for different initial grain size

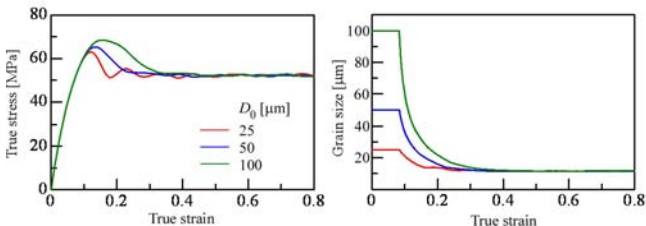


Fig.3 Stress-strain curves and changes in grain size for Fig.2

図6はひずみ速度を、ひずみ0.4と0.8において変化させた場合の結果であり、赤線はひずみ速度を0.001→0.01→0.1 s<sup>-1</sup>、青線はひずみ速度を0.1→0.01→0.001 s<sup>-1</sup>と変化させた結果である。詳細な考察は講演当日に行う。

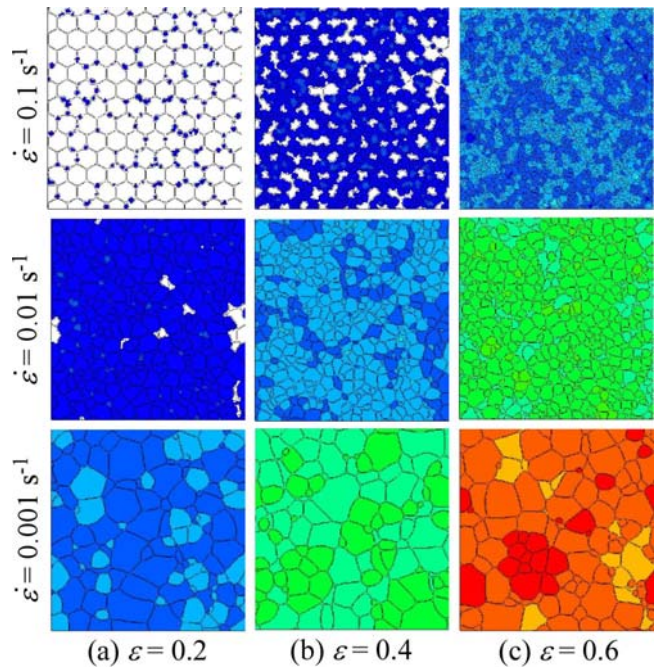


Fig.4 Microstructure evolutions for different strain rate

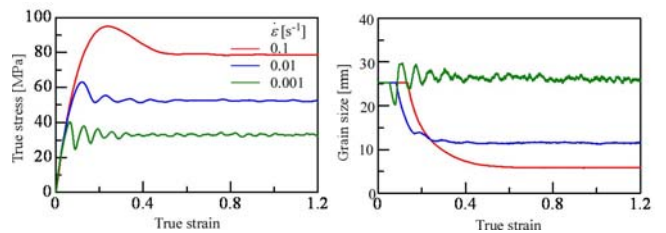


Fig.5 Stress-strain curves and changes in grain size for Fig.4

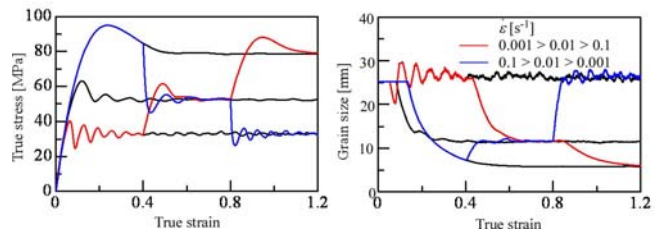


Fig.6 Stress-strain curves and changes in grain size for transient deformation conditions

### 参考文献

- (1) T. Sakai, J. J. Jonas, Acta Metall. 32 (1984) 189-209.
- (2) J. Yanagimoto, K. Karhausen, A.J. Brand, R. Kopp, J. Manuf. Sci. Eng., 120 (1998) 316-322.
- (3) J.R. Cho, H.S. Jeong, D.J. Cha, W.B. Bae, J.W. Lee, J. Mater. Proc. Tech., 160 (2005) 1-8.
- (4) E.P. Busso, Int. J. Plasticity, 14 (1998) 319-353.
- (5) R. Ding, Z.X. Guo, Acta Mater., 49 (2001) 3163-3175.
- (6) G. Kugler, R. Turk, Acta Mater., 52 (2004) 4659-4668.
- (7) T. Takaki, T. Hirouchi, Y. Hisakuni, A. Yamanaka, Y. Tomita, Mater. Trans., 49 (2008) 2559-2565.
- (8) T. Takaki, Y. Hisakuni, T. Hirouchi, A. Yamanaka, Y. Tomita, Comp. Mater. Sci., 45 (2009) 881-888.
- (9) M. Frommerta, G. Gottsteinb, Mater. Sci. Eng. A, 506 (2009) 101-110.
- (10) I. Steinbach, F. Pezzolla, Physica D 134 (1999) 385-393.