

フェーズフィールド法と結晶塑性有限要素法による 再結晶組織予測手法の構築

Development of recrystallization structure prediction method
by phase-field method and crystal plasticity finite element method

京都工芸繊維大学 高木 知弘
Tomohiro TAKAKI, Kyoto Institute of Technology

1. はじめに

アルミ合金において、再結晶による結晶粒制御は、材料の機械的特性をコントロールするために極めて重要である。コンピュータを援用した数値シミュレーションによる再結晶組織予測が多く行われているが、その多くが粒成長のみを取り扱ったものである。再結晶は塑性加工後の焼きなまし時に生じる現象であり、再結晶組織は塑性変形に強く依存することが広く知られている。このため、高い精度で再結晶組織を予測するためには、塑性変形を含んだ評価を行う必要がある。

著者のグループでは、結晶塑性有限要素法から変形組織を予測し、その結果を phase-field (PF) 法による再結晶シミュレーションに用いることで、塑性変形と熱処理を連続して評価可能な再結晶組織予測手法の構築を行っている。ここで、再結晶シミュレーションでは核生成条件の設定が必要となり、その条件設定により結果が異なることが指摘されている⁽¹⁾。

本研究では、結晶塑性有限要素法の結果から変形サブグレイン組織を予測し、そのサブグレイン構造から再結晶シミュレーションを行うモデルの構築を行う。本モデルでは、粒界エネルギーのバランスのみで粒成長を表現するため、異常粒成長による自発的な核生成が可能となる。

2. 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、

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

が広く用いられる⁽²⁾。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、

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

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)からサブグレイン直径 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⁽³⁾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⁽⁴⁾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[3]によると、粒 i 内で1、他粒内で0、粒界で $0 < \phi_i < 1$ の値をとる phase field ϕ_i 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 $\phi_i > 0$ 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。

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

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。

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

式(2)と式(8)で表される粒界エネルギーと粒界モビリティの方位差依存性の導入により、異常粒成長による自発的な再結晶粒の核生成が可能となる。

3. シミュレーション結果

図1は結晶塑性有限要素シミュレーションで用いる粒構造と、その圧縮シミュレーション時の粒界の変形状態を示している。0.1 mm×0.1 mmの領域を64×64のcrossed triangles要素に分割し、2すべり系平面ひずみ問題として計算を行っている。再結晶シミュレーションでは、図中の長方形で示した領域を対象とする。

図2は、再結晶解析領域における蓄積エネルギーと結晶方位の分布を示している。これらの結果に基づき、変形サブグレイン組織を予測する。予測された組織を図3(a)に示している。圧縮ひずみ $\epsilon=0.3, 0.4, 0.45$ の結果を示しており、生成されたサブグレインの数は、それぞれ2253, 3007, 3368となっており、変形が大きいほど蓄えられたエネルギーが大きく、多くのサブグレインが形成されていることがわかる。また、図2と図3(a)を比較すると、蓄積エネルギーが大きいところに細かい粒が形成され、結晶塑性解析結果を適切に反映したサブグレイン構造の予測を行えていることが確認できる。

図3(b)(c)(d)は、再結晶シミュレーション20,000, 40,000, 100,000 step時のサブグレイン組織を示している。色づけている粒は、初期サイズの2倍以上の大きさになった粒である。この粒を再結晶粒と仮定し、その面積分率の変化を示したのが図4である。変形量に依存した典型的な再結晶曲線を見ることができる。

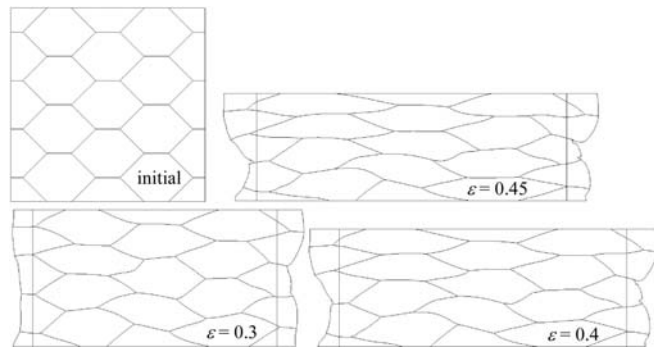


Fig.1 Deformations of grain structure during crystal plasticity finite element simulation.

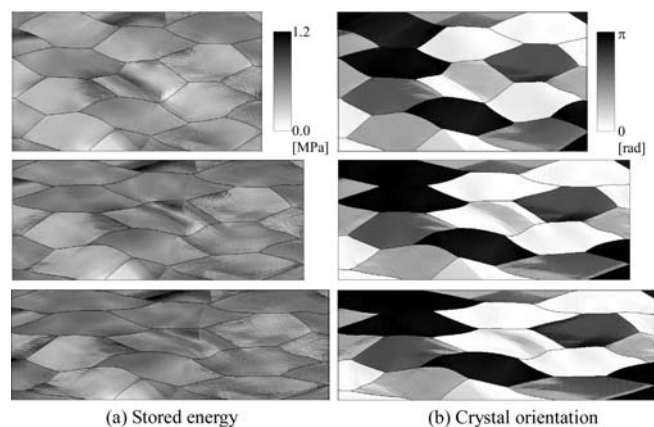


Fig.2 Distributions of (a) stored energy and (b) crystal orientation in the computational domain for recrystallization simulations.

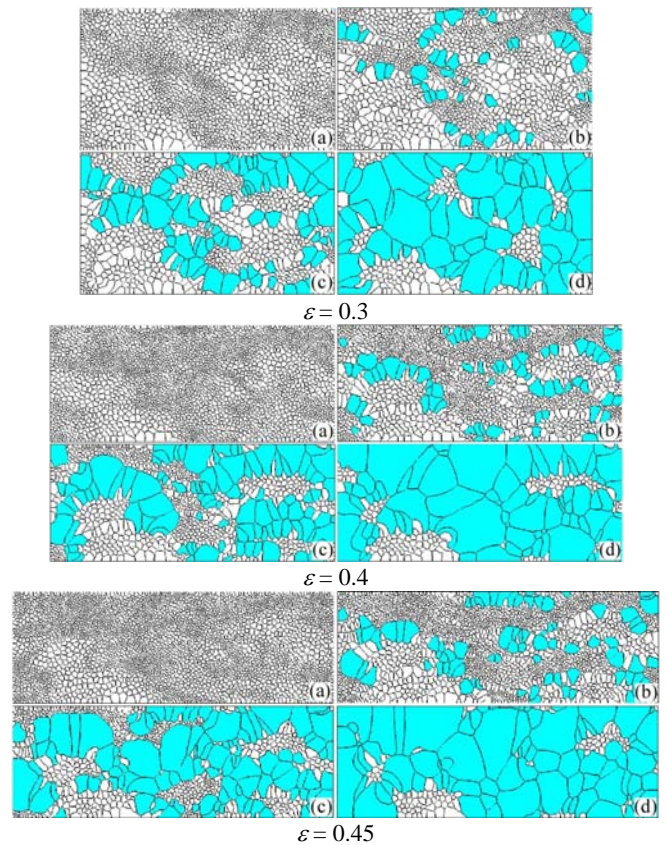


Fig.3 Structure evolutions during recrystallization simulations

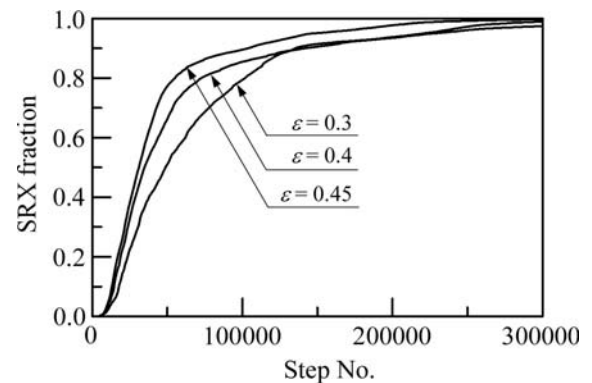


Fig.4 Changes in recrystallization fraction

4. おわりに

結晶塑性有限要素シミュレーションの結果から変形サブグレイン構造を予測し、その構造から再結晶シミュレーションを行う手法を構築した。詳細は講演当日に発表する。

5. 参考文献

- (1) T. Takaki, A. Yamanaka, Y. Higa, Y. Tomita, J. Comp.-Aid. Mater. Des., 14 (2007) 75.
- (2) F.J. Humphreys and M. Hatherly, Recrystallization and Related Annealing Phenomena, Elsevier, (2004).
- (3) I. Steinbach and F. Pezzolla, Physica D, 134 (1999), 385.
- (4) S. G. Kim, D. I. Kim, W. T. Kim and Y. B. Park, Phys. Rev. E, 74 (2006), 061605