

KWC Phase-field モデルの再結晶問題への適用可能性の検討

Investigations of applicability of KWC phase-field model to recrystallization problem

正 高木 知弘 (神戸大・院)
正 富田 佳宏 (神戸大・院)

学 田中 克昌 (神戸大・院)

Tomohiro TAKAKI, Graduate School of Maritime Sciences, Kobe University, Kobe
Katsumasa TANAKA, Graduate School of Science and Technology, Kobe University, Kobe
Yoshihiro TOMITA, Graduate School of Engineering, Kobe University, Kobe

Key Words : Phase-Field Method, Static Recrystallization, Coupled Model

1 緒言

塑性変形した材料を焼きなまして得られる再結晶組織は、変形組織の影響を強く受けることが知られている。そのため、再結晶組織を精度良く予測するためには、変形と再結晶の両プロセスを連続して評価する必要がある。著者らは文献 [1] において、変形組織を結晶塑性有限要素法により評価し、そこで得られた蓄積エネルギーと結晶方位を用いて Phase-field 法により再結晶組織を予測する連成数値モデルを構築した。Phase-field モデルは、多結晶凝固シミュレーションに多用されている KWC(Kobayashi, Warren, Carter) モデル⁽²⁾を静的な一次再結晶問題へ一般化している。

多結晶体を表現する Phase-field モデルは、KWC モデルと MPF(Multi-Phase-Field)⁽³⁾⁽⁴⁾モデルが知られている。MPF 法は一つの結晶方位を一つの phase field 変数で表すため、無限の結晶方位を考慮するためには膨大な計算コストを必要とする。また、Chen ら⁽³⁾の MPF モデルでは駆動力成長を取り扱うことが困難である。一方、KWC モデルは phase field と結晶方位の 2 つの秩序変数のみ使用し、駆動力を考えることも容易である。このため、文献 [1] では KWC phase-field モデルを採用している。しかしながら、最近 MPF シミュレーションを効率的に行うことを可能とするアルゴリズムが Kim ら⁽⁵⁾によって報告され、さらに Steinbach らの MPF モデル⁽⁴⁾では interface field の概念を導入し解析領域を粒界上に限定することが可能であるため、MPF シミュレーションをより高速化することができる。一方、KWC モデルは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、および 3 次元問題への拡張が比較的困難であるという欠点を有している。

本研究では、文献 [1] で構築した解析手順において、Steinbach らの MPF モデル⁽⁴⁾を用いる再結晶数値モデルを構築し、KWC モデルの結果と比較を行い、KWC phase-field モデルの再結晶問題への適用性について検討を行う。MPF 数値シミュレーションにおいては、Kim らの手法⁽⁵⁾をより高精度化したアルゴリズムを導入する。

2 MPF モデルと解析手順

Steinbach らが提案した Interface field の概念を用いた MPF モデルにおいて、phase field ϕ_i の時間発展方程式

は次のように表される。

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

ここで、 W_{ij} はエネルギー障壁、 a_{ij} は勾配係数、 M_{ij}^ϕ はモビリティであり、それぞれ次式により界面幅 δ 、界面エネルギー γ_{ij} 、粒界モビリティ M_{ij} に関係付けることができる。

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

また、 ΔE_{ij} は蓄積エネルギーであり、変形粒 - 変形粒お

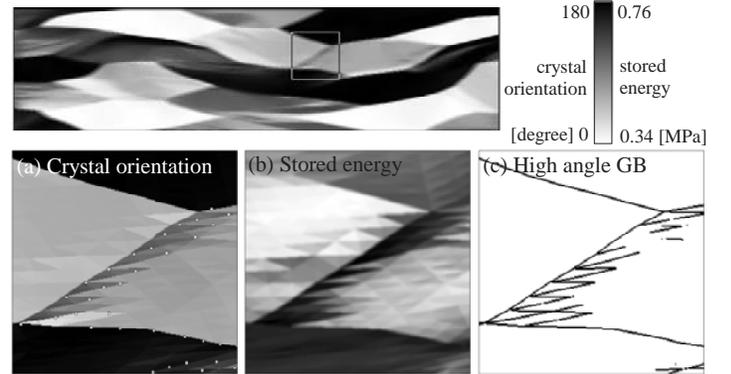


Fig. 1 Crystal orientation distribution at 50% compression and computational domain for MPF simulation

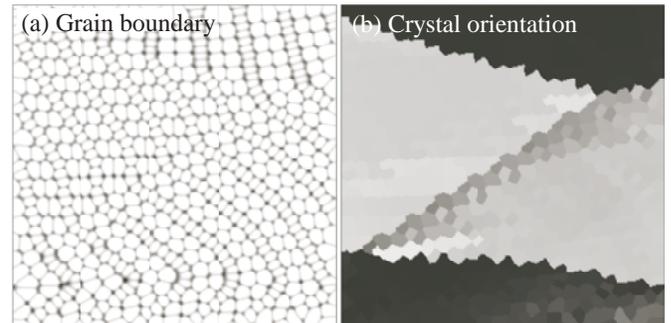


Fig. 2 Created initial grain structure for MPF simulation

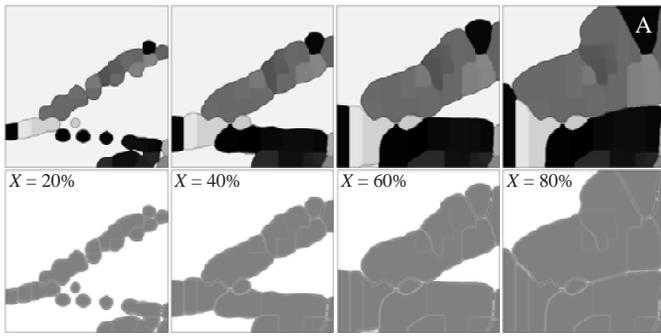


Fig. 3 Crystal orientation and recrystallized grains for $X = 20, 40, 60$ and 80% (KWC model)

よび再結晶粒 - 再結晶粒の粒界では $\Delta E_{ij} = 0$, 変形粒 - 再結晶粒の粒界では $\Delta E_{ij} = E_{store}$ としている. E_{store} は結晶塑性解析から算出される蓄積エネルギーである. 式 1 中 n は interface field の数であり, 粒内で $n = 1$, 粒界で $n = 2$, 三重点で $n = 3$ となる. ここで, $n = 1$ の領域は数値解析を行う必要が無いので, 解析領域内の粒界の割合が小さくなるほど数値シミュレーション速度は速くなる.

文献 [1] で構築した変形 - 粒成長の連成解析の手順は次の通りである.

1. 結晶塑性有限要素法による多結晶体の変形シミュレーション.
2. 蓄積エネルギーと結晶方位の Phase-field 差分格子へのデータマッピングと蓄積エネルギーの平滑化, および核生成条件の決定.
3. 再結晶粒成長過程の Phase-field シミュレーション.

MPF モデルを用いる場合も同様の手順であるが, 手順 3 において変形粒の多結晶構造を前もって作成する必要がある. 結晶塑性解析では, 三角形要素を用いた有限要素シミュレーションを行っているため, ここでは三角形要素毎に phase field ϕ_i を割り振る. 図 1 は文献 [1] で行った 23 定型粒を有する材料を 50% 圧縮した際の結晶方位分布を示している. ここで, 図中の正方形領域を Phase-field シミュレーションの対象とし, 図 1 の下側に結晶方位, 蓄積エネルギー, 高角粒界の分布を示している. この領域内には 627 個の三角形要素があるため, 同数の phase field ϕ_i を用いる. まず, 三角形要素の重心に各 phase field ϕ_i の核を置き, 一定駆動力の下で通常の粒成長シミュレーションを行い, 初期多結晶体を生成する. この場合, 隣接する三角形によっては同じ方位を有する場合もあるが, 本モデルは粒界エネルギーも表現できるため, 作業を簡素化するために triangle 要素毎に phase field を持たせている. この結果得られた初期粒構造を, 図 2 に粒界と結晶方位の分布により示している. 図 1(a) に白点で 35 個の再結晶核の配置位置を示している.

3 シミュレーション結果

図 1 と図 2 の結果に基づき, 再結晶粒成長 Phase-field シミュレーションを行う. 図 3 ~ 5 は再結晶分率 $X = 20, 40, 60, 80\%$ 時の結晶方位と再結晶領域を示している. 図 3 は KWC モデルによる結果である. KWC モデルでは, 変形材中の方位は考えないため⁽¹⁾, 変形材中の方位は示していない. 図 3 より, 円形状の再結晶核が成長し, 衝突して再結晶粒界を形成していることがわかる. 図 4

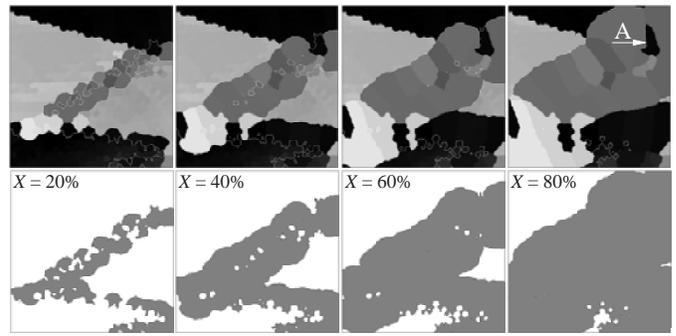


Fig. 4 Crystal orientation and recrystallized grains for $X = 20, 40, 60$ and 80% (MPF model)

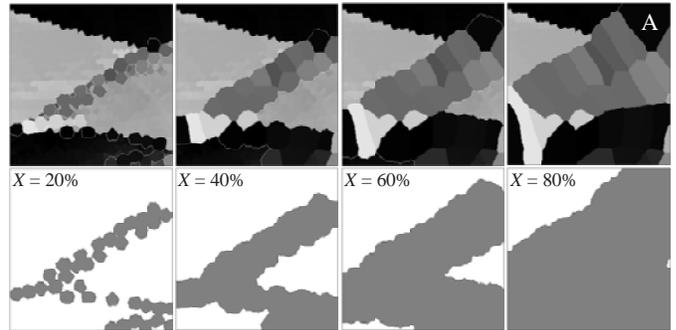


Fig. 5 Crystal orientation and recrystallized grains for $X = 20, 40, 60$ and 80% (MPF model without misorientation dependency)

は粒界における方位差を次式により導入した MPF モデルの結果である.

$$\gamma(\Delta\theta) = \gamma_m \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_m} \left(1 - \ln \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_m}\right) \dots\dots\dots (3)$$

$$M(\Delta\theta) = M_m \left[1 - \exp\left\{-5 \left(\frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_m}\right)^4\right\}\right] \dots\dots\dots (4)$$

ここで, $\Delta\theta$ は方位差, $\Delta\theta_m = 15^\circ$, γ_m と M_m は高角粒界における粒界エネルギーと粒界モビリティを示している. 図 5 は $\gamma(\Delta\theta) = \gamma_m$, $M(\Delta\theta) = M_m$ の場合の MPF シミュレーションの結果である. いずれの結果も, 再結晶領域は同様に変化していることがわかる. 一方, 再結晶領域内の結晶方位つまり再結晶組織には違いが確認できる. 例えば, 領域右上の A で示される再結晶粒は, 図 3 と図 5 では同様な成長をするのに対して, 図 4 では周りの再結晶粒の成長が早くなり, 再結晶領域の内部に取り残されている. 詳細な考察は発表当日行う.

参考文献

- (1) 高木知弘, 山中晃徳, 比嘉吉一, 富田佳宏, 機論, **73** A(2007), 482 - 489.
- (2) J. A. Warren, R. Kobayashi, A. E. Lobkovsky, W. C. Carter, *Acta Mater.*, **51** (2003), 6035 - 6058.
- (3) L.-Q. Chen, W. Yang, *Phys. Rev. B*, **50** (1994), 15752 - 15756.
- (4) I. Steinbach, F. Pezzolla, *Physica D*, **134** (1999), 385 - 393.
- (5) S. G. Kim, D. I. Kim, W. T. Kim, Y. B. Park, *Phys. Rev. E*, **74** (2006), 061605-1 - 061605-14.