

Phase-field 法と均質化法による炭素鋼の組織形成および変形挙動評価 Evaluation of Deformation Behavior and Microstructural Formation in Carbon Steel Using Phase-Field Method and Homogenization Method

山中 晃徳 (神戸大・院) 高木 知弘 (神戸大・海科) 富田 佳宏 (神戸大・院)
Akinori YAMANAKA, Graduate School of Science and Technology, Kobe University
Tomohiro TAKAKI, Faculty of Maritime Sciences, Kobe University
Yoshihiro TOMITA, Graduate School of Science and Technology, Kobe University
FAX: 078-803-6321, E-mail: yamanaka@solid.mech.kobe-u.ac.jp

A numerical simulation model for microstructure design of Fe-C alloy is developed employing the phase-field method and the homogenization method. The phase-field simulations and the elastic-plastic finite element analysis based on the homogenization method with proposed model are systematically conducted in order to predict the evolution of ferrite phase during the isothermal austenite-to-ferrite transformation and to investigate the effects of the morphology of ferrite phase on the mechanical properties of the Fe-C alloy.

1. 緒言

鉄鋼材料の機械的特性は、材料内部の微視組織形態に依存して変化する。したがって、所望の機械的特性を有する鉄鋼材料を創製するためには、微視組織形成過程を予測し、微視組織形態が材料の機械的特性に及ぼす影響を陽に反映した力学特性評価を行う必要がある。しかしながら、これを実験的手法のみによって実施することは困難であり、近年では数値シミュレーションを援用した材質予測技術を確認する試みがなされている。

本研究では、代表的な鉄鋼材料である Fe-C 合金の微視組織形成予測と力学特性評価を系統的に実施可能な、材質予測シミュレーション法を構築する。はじめに、組織形成予測の強力な数値解析手法として注目されている Phase-field 法を用いて、Fe-C 合金の $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による組織形成過程をシミュレートする。次いで、得られた微視組織形態を表現する代表体積要素 (RVE) を作成し、均質化法に基づく弾塑性有限要素解析を行うことにより、微視組織形態が材料の変形挙動に及ぼす影響を検討する。

2. Phase-field 法¹⁾

Fe-C 合金の全自由エネルギーは、Ginzburg-Landau 型の Gibbs の自由エネルギー汎関数で以下のように表される。

$$G = \int_V \left\{ g(\phi, u_C, T) + \frac{a(\theta)^2}{2} |\nabla \phi|^2 \right\} dV \quad (1)$$

ここで、 ϕ はフェライト相 (α 相) の存在確率を表す秩序変数 phase field であり、オーステナイト相 (γ 相) で $\phi = 0$ 、 α 相で $\phi = 1$ の値をとる。 u_C は炭素濃度である。式(1)の右辺第 1 項は Fe-C 合金の化学的自由エネルギーであり、 α 相と γ 相単相の化学的自由エネルギー密度の重み付け和として、次式で表される。

$$g(\phi, u_C, T) = p(\phi)g^\alpha(u_C, T) + (1-p(\phi))g^\gamma(u_C, T) + Wq(\phi) \quad (2)$$

また、微視組織形態を特徴づける α/γ 界面の異方性は、式(1)の勾配エネルギー項の示す勾配エネルギー係数に、以下のように異方性を導入することにより表現する。

$$a(\theta) = \begin{cases} a_0 \{1 + \xi \cos k(\theta - \theta_0)\} = \bar{a}(\theta) & (\text{for } 2\pi/k + \theta_m \leq \theta - \theta_0 \leq 2\pi(i+1)/k + \theta_m) \\ \frac{\bar{a}(\theta_m + \theta_0)}{\cos \theta_m} \cos(\theta - \theta_0) & (\text{for } 2\pi/k - \theta_m \leq \theta - \theta_0 \leq 2\pi/k + \theta_m) \end{cases} \quad (3)$$

ここで、 θ 、 ξ 、 k 、 θ_m はそれぞれ界面の法線と x 軸のなす角度、異方性強度、異方性モード数、missing orientation である。

$\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による界面移動を記述する phase field の時間発展方程式は、Allen-Cahn 方程式から導出され、次式で表される。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \left\{ \nabla \cdot (a^2 \nabla \phi) - \frac{\partial g}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a \frac{\partial a}{\partial \theta} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(a \frac{\partial a}{\partial \theta} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right\} \quad (4)$$

ここで、 M_ϕ は α/γ 界面の易動度 $M_{\alpha/\gamma}$ に関係づけられた phase field の易動度である。

一方、炭素濃度 u_C の時間発展方程式は Cahn-Hilliard 方程式から導出され、次式で表される。

$$\frac{\partial u_C}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ L(\phi, u_C, T) \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_C^2} \nabla u_C + \frac{\partial^2 g}{\partial u_C \partial \phi} \nabla \phi \right) \right\} \quad (5)$$

ここで、 $L(\phi, u_C, T)$ は炭素濃度の易動度であり、炭素濃度、空格子濃度、Fe 原子のモル体積および炭素原子の易動度 M_C に関係づけられる。

3. 均質化法に基づく弾塑性有限要素法

Phase-field 法による組織形成シミュレーションで得られた微視組織を有する、Fe-C 合金の微視および巨視的な力学特性を評価するため、均質化法に基づく弾塑性有限要素解析を行う²⁾。本研究では、微視組織を構成する各相の変形挙動が J₂ 流れ理論に従うとし、次式に示す Prandtl-Reuss の式を用いて、Fe-C 合金の変形挙動を記述する³⁾。

$$\overset{\nabla}{S}_{ij} = \left(D_{ijkl}^e - \frac{3G\sigma'_{ij}\sigma'_{kl}}{\bar{\sigma}^2(H'/3G+1)} \right) \dot{\epsilon}_{kl} \quad (6)$$

ここで、 $\overset{\nabla}{S}_{ij}$ は Kirchhoff 応力の Jaumann 速度、 D_{ijkl}^e は弾性係数テンソル、 σ'_{ij} は偏差応力、 $\bar{\sigma}$ は相当応力、 $\dot{\epsilon}_{ij}$ はひずみ速度および H' は塑性の接線係数である。

さらに、巨視領域と微視領域における変形挙動を記述する支配方程式は、巨視領域および微視領域の座標系 x_i 、 y_i の 2 変数を用いて変位を漸近展開し、均質化法を適用することにより導出する。なお、数値シミュレーションでは、支配方程式を有限要素法を用いて離散化し、数値解析する。

4. 解析モデル

図 1(a) に Phase-field 法による組織形成シミュレーションに用いる、解析モデルを示す。本研究では $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による α 相の形成過程をシミュレートするため、 $5\mu\text{m} \times 6\mu\text{m}$ の解析領域内に初期 α 相を配置する。このとき、初期 α 相は六角形状の γ 粒界の各辺に形成されることを想定して配置

し、各辺の α 相ごとに優先成長方向 θ_0 を与えている。また、変態温度は 1000K 一定とし、各相の初期炭素濃度は α 相で平衡組成、 γ 相で過飽和としている。界面エネルギーは $\sigma = 1.0 \text{ J/m}^2$ 、異方性モード $k=2$ としている。

図 1(b), (c) に均質化法による力学特性評価に用いる、解析モデルを示す。解析条件は 2 次元平面ひずみ状態とし、ひずみ速度 $\dot{E} = 10^{-3} / \text{s}$ で一様な引張り変形を与える。巨視領域の任意点近傍には、組織形成シミュレーションで得られた微視組織を表現する RVE が周期的に配列しているとする。RVE は組織形成シミュレーションで得られた、解析データを用いて画像処理により作成している⁴⁾。なお、組織形成シミュレーションにおいて、未変態の γ 相は熱処理後の室温への冷却過程を経て、パーライト組織に相変化するものとして各相に物性値を与え、力学特性評価を行う⁵⁾。

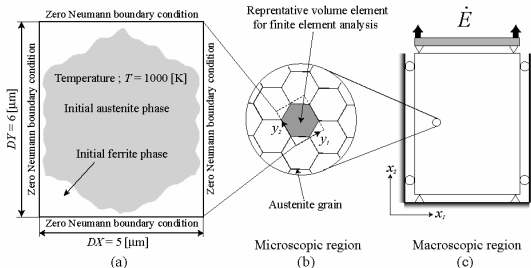


Fig.1 Computational models and initial conditions.

5. Fe-C 合金の $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態によるフェライト相組織形成

図 2 に Phase-field 法による組織形成シミュレーションで得られた、 α 相の形成過程における炭素濃度分布を示す。図 2(a)~(d) に示すように、異方性強度 $\xi = 0.1$ の場合には、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態により Allotriomorph フェライト (α_G) が形成していることわかる。一方、図 2(e)~(h) に示すように異方性強度 $\xi = 0.5$ の場合は、鋭いチップ先端形状を有する Widmanstätten フェライト (α_W) が形成しており、 α_G 形成よりも界面の移動速度が大きいことが観察できる。このとき、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態に伴う炭素拡散により α/γ 界面近傍の γ 相において炭素濃度が増加していることがわかる。

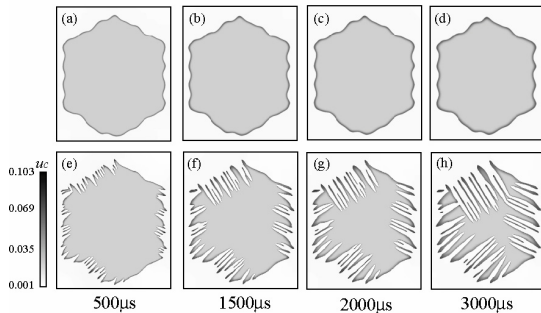


Fig.2 Growth of (a)~(d) Allotriomorph ferrite and (e)~(h) Widmanstätten ferrite.

6. 微視組織形態が Fe-C 合金の変形挙動に及ぼす影響

Phase-field 法による組織形成シミュレーションで得られた、微視組織を有する Fe-C 合金の力学特性評価を行い、 α 相の形態が巨視領域および微視領域における変形挙動に及ぼす影響を検討する。

図 3 に α_G または α_W を有する微視組織として、図 2(d), (f), (h) に示した組織形態 (以下、組織 A, B, C とする) を表現する、RVE および α 相の体積分率を示す。また図 4 に、これらの RVE を用いた引張り変形解析により得られた、巨視領域における公称ひずみ-公称応力関係を示す。内部組織に α_G

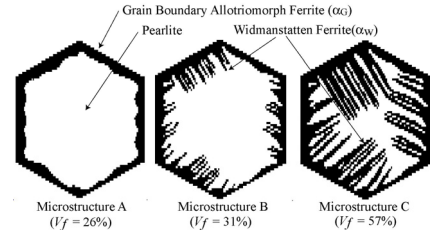


Fig.3 RVEs and volume fraction of ferrite phase.

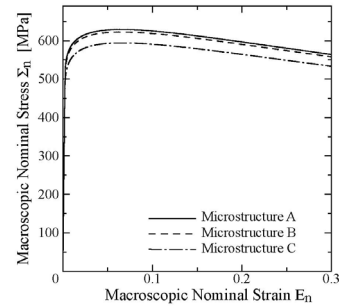


Fig.4 Macroscopic nominal stress vs. nominal strain

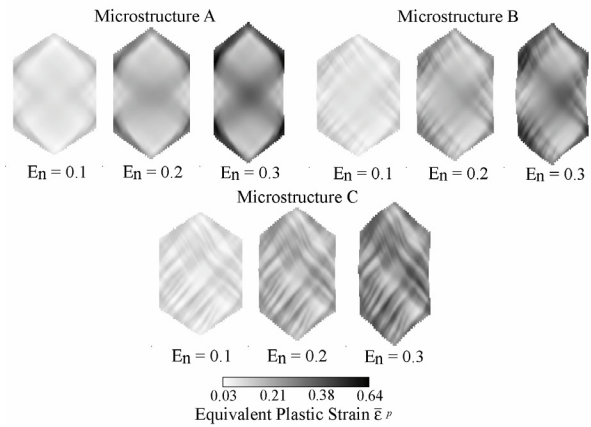


Fig.5 Distributions of microscopic equivalent strain.

を有する Fe-C 合金において、最も大きな引張り抵抗を示していることがわかる。一方、 α_W を内部組織に有する場合は、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態が進行し α_W が成長するほど、硬質なパーライト組織の体積分率が減少するため、巨視的な流動応力は低下する傾向が認められる。

図 5 に、各組織の微視領域における相当塑性ひずみ分布を示す。組織 A では、巨視的なひずみ量の増加に伴って、パーライト組織よりも軟質な α_G において大きな塑性ひずみを生じていることが観察できる。しかしながら、組織 B, C においては、旧 γ 粒界近傍での塑性変形は軽減され、 α_W に塑性変形が集中していることがわかる。

以上の結果から、本研究で提案する Phase-field 法と均質化法を用いた材質予測シミュレーションを実施することにより、鉄鋼材料の熱処理過程における、どの段階の微視組織が所望の機械的特性を有しているのかを、より系統的に評価可能であることが示唆される。

参考文献

- 1) A. Yamanaka, et al: Mater. Trans., 47, pp.2725-2731, 2006.
- 2) J. M. Guedes, et al: Comput. Meths. Appl. Mech. Engin., 83, pp.143-198, 1990.
- 3) 富田佳宏: 数値弾塑性力学, 養賢堂.
- 4) 寺田賢二郎他: 日本機械学会論文集 A 編, 64, pp.170-177, 1998.
- 5) N. Ishikawa, et al: ISIJ Int., 40, pp.1170-1179, 2000.