

Multi-phase-field 法による動的再結晶のモデリングとシミュレーション

京都工芸繊維大学 [院] 高木 知弘 神戸大学 [院] 久國 陽介
神戸大学 [院] 富田 佳宏

Multi-Phase-Field Modeling and Simulation for Dynamic Recrystallization

Tomohiro TAKAKI, Yousuke HISAKUNI and Yoshihiro TOMITA

1 緒 言

低中積層欠陥エネルギーを有する材料を高温環境下で変形させる場合、変形による転位の蓄積と再結晶が同時に生じる。この場合の再結晶を、冷間加工後の焼鈍時に生じる静的再結晶 (SRX) に対して動的再結晶 (DRX) と呼ぶ^{(1),(2)}。このように、DRX は塑性変形と粒成長が同時に生じる複雑な現象であるがゆえに、微視組織を再現可能な数値モデルはこれまで構築されていないとも言えないようである。本研究では、転位発展式と Multi-phase-field (MPF) 法による DRX 数値モデルを構築する。

2 DRX モデル

2.1 MPF モデル 一つの粒は一つの phase field ϕ_i によって表す。Steinbach ら⁽³⁾ の MPF モデルを採用すると、 ϕ_i の時間発展方程式は次のように表すことができる。

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

ここで、 n は 0 より大きな値を有する phase field の数、 a_{ij} , W_{ij} and M_{ij}^ϕ はそれぞれ勾配係数、エネルギー障壁、phase field モビリティであり、次の式により粒界幅 δ 、粒界エネルギー γ_{ij} 、粒界モビリティ M_{ij} と関係付けることができる。

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

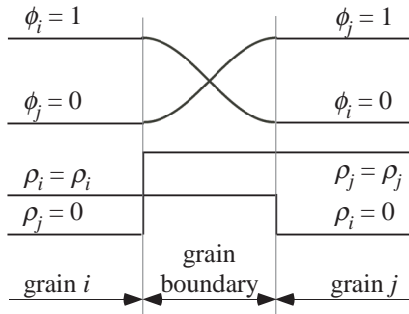


Fig. 1 Schematic illustration of profiles of phase fields and dislocation densities around grain boundary

また、 ΔE_{ij} は駆動力であり、 $\Delta E_{ij} = \tau(\rho_j - \rho_i)$ と表すことができる。ここで、 τ は転位線エネルギー、 ρ_i と ρ_j は図 1 に示す粒 i と j 内の転位密度である。

2.2 転位密度発展モデル 変形による転位の蓄積と動的回復による転位の消滅は、次の Kocks-Meching モデルにより表す。

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

ここで、 k_1 は加工硬化を表す定数、 k_2 は動的回復の程度を表す温度とひずみ速度の関数である。マクロな応力は、次式により平均転位密度と関係付けられる。

$$\sigma = \alpha \mu b \sqrt{\bar{\rho}}, \quad (4)$$

ここで、 α は定数、 μ 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。式 (3) と (4) より、マクロな応力-ひずみ関係が決定される。

2.3 解析手順 はじめに、すべての粒内で、初期転位密度を一定とする。式 (3) によりひずみ増分 $\Delta\varepsilon$ 毎の転位密度変化を算出し、式 (4) により応力を計算

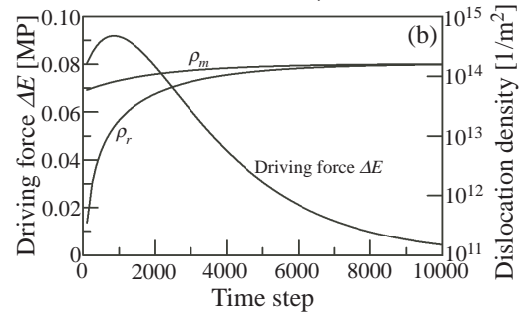
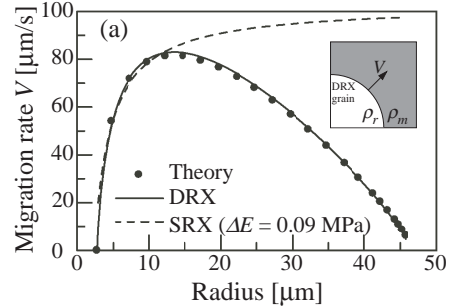


Fig. 2 Variations in (a) migration rates of grain boundary and (b) driving force and dislocation densities

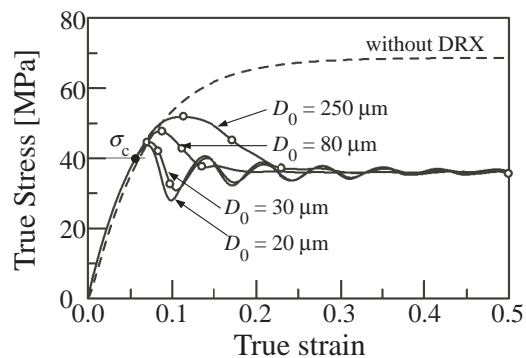


Fig. 3 Stress-strain curves

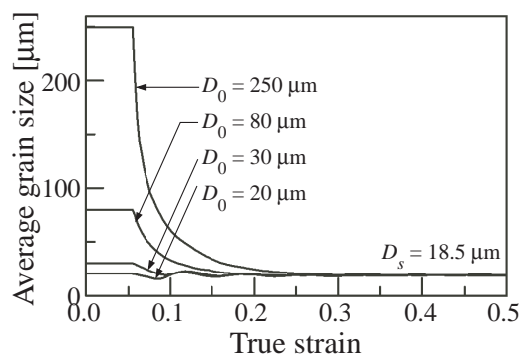


Fig. 4 Variations in average grain size

する．応力値が DRX の核生成の臨界値に達したら，核生成速度に対応して粒界上に核を配置し，式 (1) により DRX 粒の成長過程をシミュレートする．以上の手順を所定のひずみ値まで続ける．

3 シミュレーション結果

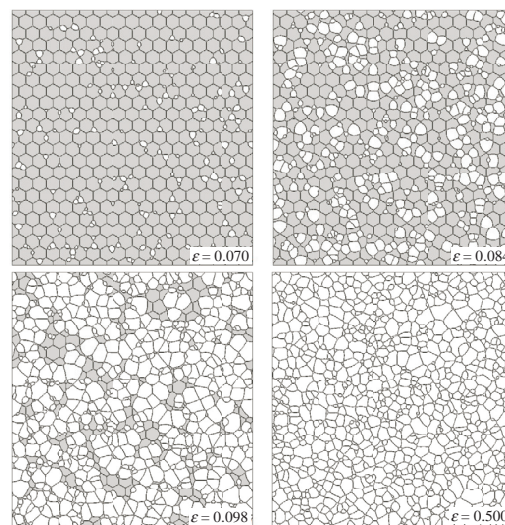
図 2 は本研究で構築した手法の精度を評価するために，一つの DRX 粒を成長させた際の，粒界移動速度，駆動力，各粒内の転位密度の変化を示したものである．この図より，MPF 法による結果は理論解と非常によく一致しており，本手法が DRX の成長過程を精度良く評価可能であることを確認することができる．

図 3 と図 4 は，図 5 に示すような DRX 過程のマクロな応力-ひずみ関係と平均粒径の変化を示している．ここで，初期粒サイズは $D_0 = 20, 30, 80, 250 \mu\text{m}$ としている．図 3 から，初期粒径が小さい場合，応力-ひずみ曲線は複数のピーク値を持ち，初期粒径が大きい場合は，単一ピークを示すことがわかる．また，図 4 より，最終的な平均粒径はほぼ同じ値になることが確認できる．以上のような現象は，これまでの実験および数値解析により確認されている⁽⁴⁾．さらに，図 5 より，初期粒径が大きい場合は，典型的なネックレス構造を示している．また，この図から分かるように，初期粒径が小さい場合，DRX 核の優先的な生成サイトである粒界の面積が増大し，DRX 初期に多くの核が形成される．このため，図 3 に示す応力-ひずみ曲線では，ピーク応力が初期粒径が小さいほど低い値を示すことが確認できる．以上のように，本手法は微視組織発展に依存するマクロな力学的挙動を評価可能であることが確認できる．

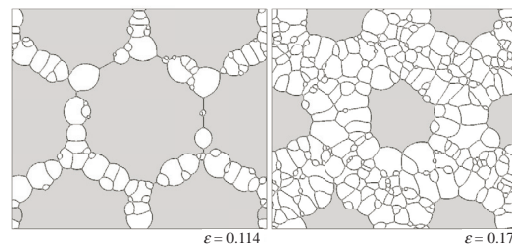
参考文献

- (1) F. J. Humphreys and M. Hatherly: *Recrystallization and Related Annealing Phenomena*, (Elsevier, 2004) pp.415-450.
- (2) T. Sakai and J. J. Jonas: *Acta Metall.* 32(1984) 189-209.

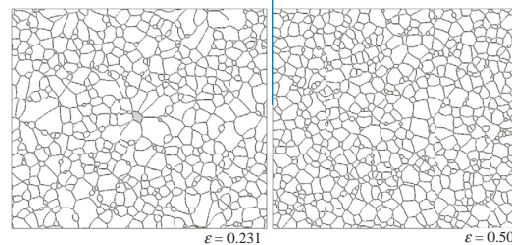
- (3) I. Steinbach and F. Pezzolla: *Physica D* 134(1999) 385-393.
- (4) R. Ding and Z. X. Guo: *Acta Mater.* 49(2001) 3163-3175.



(a) $D_0 = 30 \mu\text{m}$



(c) $D_0 = 250 \mu\text{m}$



(c) $D_0 = 250 \mu\text{m}$

Fig. 5 Microstructure evolutions during DRX. Strain values correspond to open circles in Fig.2