

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 10 日現在

機関番号：11501

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23560079

研究課題名(和文) フェーズフィールドモデルによるミクロ・マクロ連成力学解析手法の構築

研究課題名(英文) Development of coupling scheme for micro- and macroscopic mechanics using phase field model

研究代表者

上原 拓也 (Uehara, Takuya)

山形大学・理工学研究科・准教授

研究者番号：50311741

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,100,000円、(間接経費) 1,230,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、材料のマクロな力学特性とミクロな微視組織の関係を考慮した材料の力学解析モデルの構築を行った。マルチフェーズフィールドモデルをベースとして、各相の力学特性を考慮することによって、微視組織の形状や形態がマクロな力学特性に与える影響を求めることが可能なモデルを構築した。また、このモデルを用いることにより、多結晶組織やラメラ組織内部の微視的な応力分布を求めることが可能であることを示した。また、界面での物理的特性を明らかにするため、2相モデルを用いた分子動力学解析も行い、各相の特性がマクロ特性に及ぼす影響を明らかにした。

研究成果の概要(英文)：Numerical model for mechanics of materials including the multi-scale relationship between microstructure and macroscopic material properties was developed based on multi-phase-field model. Mechanical properties of each phase were taken into account, and the modeling for investigating the effect of complex shape and morphology of microstructure on the macroscopic behavior was constructed. Availability of the developed model was validated by demonstrating simulations on microscopic stress distributions in polycrystalline material and lamellar structures. Molecular dynamics model was also developed to focus on the physical situation at the two-phase interface, and the influence of the properties of each phase on the macroscopic properties was investigated.

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学，機械材料・材料力学

キーワード：計算力学 固体力学 フェーズフィールドモデル 数値解析 相変態 分子動力学

1. 研究開始当初の背景

材料の微視的な特徴が巨視的な力学特性や強度に与える影響については、結晶粒径の影響を表す Hall-Petch の関係等の例を挙げるまでもなく、よく知られているところである。近年、これらの影響が大きくなる微細なデバイスの利用や、微視組織による特性変化を活用した材料設計・プロセス設計の必要性などの観点から、より精度の高い解析手法を構築することが求められている。そのため、微視組織の影響を直接考慮した力学解析モデルの構築が進められており、例えば、転位論や結晶塑性理論などにより、結晶構造、異方性、転位の運動などを考慮することによって、塑性変形挙動の微視組織依存性が表現されつつある。しかし、それらの理論を活用する場合、結晶方位や結晶粒の形状が、熱的または力学的な要因により、動的に変化する影響を考慮することは難しい。このような微視組織の動的な変化は、加工や熱処理過程では、材料特性を決定する支配的な要素であり、微視組織そのものの挙動を直接取り扱う手法が必要とされている。

一方、相変態などの移動境界問題を簡潔な微分方程式で表現し、それを差分法などの簡便な数値解析手法で解くことによって、デンドライトのようなきわめて複雑な形状を再現することができるフェーズフィールドモデルが注目されている。このモデルは、1993年に Kobayashi による論文が発表された後、組織形成の分野で急速に広まった。その後、一方向凝固、多結晶組織、多元系合金、共晶・共析、固相変態など、多くの微視組織形成過程の解析に応用され、さらには、多相問題を扱うマルチフェーズフィールドモデルや、原子オーダーでの解像度を扱うフェーズフィールド・クリスタル法などに拡張されている。力学との連成では、研究代表者らは、相変態をこのフェーズフィールドモデルで表現し、温度と応力を連成することによって、微視組織内の応力分布を求める手法を提案し、その定式化および有限要素解析による数値シミュレーションを行っているが、結晶異方性が含まれていない、界面領域での力学特性が適当でない、降伏・塑性現象の微視的考察がなされていない、等の問題点が残されている。また、関連する研究は、この数年の間に急速な広まりが見られ、結晶塑性解析に基づく核生成サイトの予測、応力誘起マルテンサイト変態、結晶異方性を考慮した異方性を有する組織形成など、多岐にわたりつつある。しかしその反面、解析モデルが高度に特殊化・複雑化し、フェーズフィールドモデルが当初持ち合わせた、「簡潔なモデルで複雑な現象を再現する」という特色が薄れつつある。工学的な応用を進める上でも、モデルの簡潔性は重要であり、高度な数値解析技術や、測定不能なパラメータの利用は普及の障害となっている。さらに、ほとんどの解析手法では、

微視組織を初期状態として仮定しており、微視組織がマクロ特性に影響を与えつつ、マクロな負荷によって微視組織が変化する動的過程を真に連成しながら解析できるモデルは構築されていないのが現状であった。

2. 研究の目的

そこで本研究では、凝固組織形成および固相内の微視組織変化を対象とした研究代表者らによる従来モデルを発展させ、フェーズフィールドモデルの複雑化は最小限にとどめた上で、材料の微視組織と巨視的な変形特性を真に連成した解析モデルの構築を目指すことを目的とする。特に、本研究では、研究代表者らによる従来モデルに対し、結晶異方性の導入、界面領域での力学特性の表現、結晶粒界における力学応答のモデル化、などを対象とした改良を行うことで、目的とする解析モデルの構築を図ることとする。

3. 研究の方法

結晶異方性の導入については、Steinbach らによるマルチフェーズフィールドモデルを用い、異なる方位をもつ領域を再現する。界面領域での力学特性については、従来モデルでは、単純な混合則的を用いていたが、これに代わる適切なモデルを考案する。この際、界面領域のもつ力学特性については、実験的比較が困難であることから、分子動力学解析を実行し、その結果を参照することによって、混合則に代わる定式化を図る。粒界挙動についても、分子動力学解析を行い、適切なモデル化を図る。研究期間後半には、比較的大規模な解析を行うことでマクロな特性の再現性を検証し、最終的には、熱処理等の工学プロセスにおける応力・変形と微視組織形成の再現が可能な解析モデルの完成を目指す。また、将来的には、実用的な工学問題への適用をめざし、解析精度の検証を行うことによって、ミクロとマクロを連成したマルチスケール力学解析モデルの完成を図る。なお、巨視的な変形挙動の解析には、当初、結晶塑性論を用いることを想定していたが、これについては、材料固有の条件が多数存在することとなり、総合的なモデリングが困難となるため、この手法は用いず、微視組織の形状や形態およびその分布と力学特性の関係に絞り込んだ解析を行うこととした。

4. 研究成果

(1) 結晶異方性の導入については、Steinbach らによるマルチフェーズフィールドモデルを用いることによって、結晶粒ごとに異なる方位を導入した解析を可能とした。これによって、結晶粒毎に異なる体積変化特性を与えると結晶粒分布に応じた微視的応力分布が生じることを示した。現段階では、

結晶方位の相違による力学的な特性の違いまでは考慮できていないが、今後、結晶塑性理論などを導入し、結晶方位に基づく異方性を考慮した力学解析を導入するための基礎となるモデルを作成することができた。

(2) 多結晶組織だけではなく、様々な微視組織形態を扱うことが可能となった。特に、鉄鋼材料のパラライト組織や、様々な共晶系合金などに広く見られるラメラ組織を対象とし、共晶および共析反応によるラメラ形態形成過程の解析モデルの開発を行った。また、このようなラメラ組織内部に生じる応力分布や残留応力分布を求め、強度評価や力学特性評価につなげるモデリングを行い、様々な方向性をもつ微視組織を想定し、系統的な解析を行うことによって得られるマクロな力学特性の妥当性を評価した。とくにラメラ構造をもつ材料に対して、相変態によって生じる体積変化や弾性率の相違がラメラ構造の形成に影響し、それに応じて形成中に生じる応力分布も大きく影響を受けることを示した。図1にこの計算結果を示す。図1(a)はパラメータの違いによって生じる様々なラメラ組織を示している。成長は左端から起こり、図の右方向への成長が進む。各色は相の違いを表しており、初期の γ 相が、 α 相と β 相に分離して成長し、ラメラ組織が形成される過程を再現している。このとき、 α 相と β 相の初期核を設定するが、この間隔が定常的な相間隔と異なる場合には、成長中に結合または分岐が起こり、安定な間隔が形成される。また、図1(b)は、このラメラ組織内の応力分布を表している。 α 相と β 相では比体積が異なるため、両相に引張り・圧縮の応力が発生する。このことは、界面での不連続性を引き起こし、界面強度の低下につながることを示している。

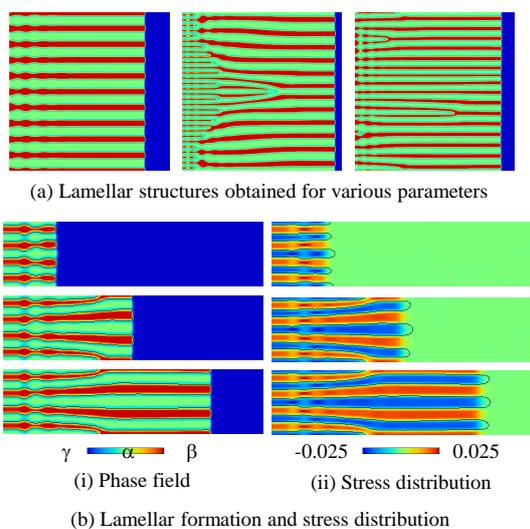


図1. ラメラ組織形成と微視組織内応力分布のシミュレーション結果 [学会発表(5)]

(3) マルチフェーズフィールドモデルに特有な結晶粒の粗大化現象について改良を行い、適正な結晶粒径分布の形態再現を可能とした。多結晶組織形成過程では、サイズの異なる結晶粒が生じる場合や比較的均一な粒径が得られる場合があるが、様々な組織形態が再現できるように、得られる粒径が制御可能な計算パラメータの導入を行った。図2がこの計算結果であり、パラメータの値によって、得られる結晶粒の大きさが異なることがわかる。また、どの場合でも、ほぼ一定の結晶粒径を示して定常化しており、従来のフェーズフィールドモデルのように、条件によらず粗大化が進行してしまうことが回避できている。現象論的ではあるが、これによって、目的とする微視組織を作成することができ、この材料のもつ巨視的特性を再現することを可能とした。

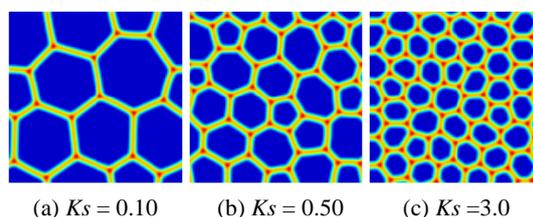


図2. 結晶粒径制御のフェーズフィールドモデル解析 [学術論文(4)]

(4) 具体的な工学プロセスへの応用例として、熱処理による表面組織変化のシミュレーションを行い、表面の結晶粒分布や残留応力分布の解析を行った。図3はその計算結果の一例であり、表面に析出する相の粒径が条件によって異なることを示している。また、図3(b)は表面層内に生じる応力分布を表している。全体的に圧縮の残留応力が生じるが、条件によって結晶粒分布に応じた微視的な応力分布が生じる。このことは、同じ析出相でも、強度に差異が生じることを示している。

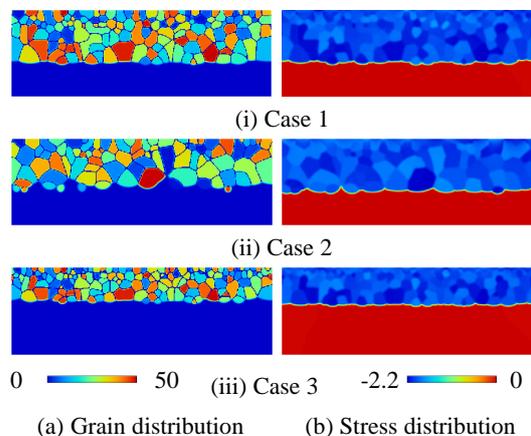


図3. 熱処理に伴う表面組織分布の変化(左)と残留応力分布(右) [学術論文(2)]

(5) 界面領域の力学特性解析については、分子動力学シミュレーションによる数値実験を行い、ラメラ構造と同様なナノスケールでの積層構造をもつモデルを用い、界面をもつ結晶性材料の弾性係数、降伏現象、および塑性変形挙動について考察した。その結果、弾性特性については、両材料の原子間相互作用の相違の他、負荷方向と界面方位の相対的な関係によって著しく異なることを明らかにした。これによって、界面の原子間相互作用と全体的な力学特性とを関連づけるメカニズムのモデル化が可能となった。このモデルは、界面における結晶面の接触状態の解析にも派生し、ユニークな解析モデルとなっている。

(6) 塑性変形特性についても、負荷方向と結晶方位の影響が明らかであるが、その挙動はきわめて複雑である。分子動力学シミュレーションでは、この複雑な現象がモデル内のどこに現れるかを予測することが難しいため、ある特定の箇所に変形の起点を誘導することによって、詳細な現象観察を容易にするモデルを作成した。今後は、このモデルを用いて、より詳細な変形メカニズムの解明とモデル化を図ることが可能であり、さらにその結果は結晶塑性解析モデルの導入に向けた基礎的なデータとすることができるといえる。

(7) フェーズフィールドモデルに不可欠な核生成条件についても、系統的な解析を進め、微視組織形成とマクロ特性の関係を調べた。その結果、マクロ解析に用いられるJohnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov形式とは異なる成長カインティクスが得られる条件があることが示された。

(8) 変態塑性現象の導入にも着手した。この現象については現象論的にはよく知られているが、メカニズムは未解明であり、原子スケールでの解析も行うことによって、より物理的なモデルに基づいた定式化を試み、フェーズフィールドモデルへの導入の基礎的知見を得た。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 4 件)

1. Takuya Uehara, Molecular dynamics simulation of tensile properties of nano-layered materials, *Advanced Materials Research*, Vol. 741 (2013), pp. 79-83. DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMR.538-541.322, 査読有.
2. Takuya Uehara, Grain growth simulation of precipitated phase on surface and evaluation of the residual stress distribution, *Advanced Materials Research*, Vols. 538-541 (2012) pp 322-325. DOI: 10.4028/www.scientific.net/AM

R.538-541.322, 査読有.

3. Takuya Uehara, An atomistic study on the slip deformation mechanism of crystalline materials using a weak-plane model, *Applied Mechanics and Materials*, Vol. 197 (2012) pp 2070-2075. DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMM.197.2070, 査読有.
4. Takuya Uehara and Hideyuki Suzuki, Numerical simulation of homogeneous polycrystalline grain formation using multi-phase-field model, *Applied Mechanics and Materials*, Vol. 197 (2012), pp 2610-2614. DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMM.197.2610, 査読有.

[学会発表] (計 13 件)

1. Takuya Uehara, Influence of random nucleation condition on transformation kinetics in phase field simulations, The 5th International Conference on Computational Methods, 2014/7/28-30, Fitzwilliam College, Cambridge, U.K.. (発表確定).
2. 上原拓也, 凝固組織形成解析におけるランダムな核生成条件の影響, 第 19 回計算工学講演会, 2014/6/11-13, 広島 (発表確定).
3. 上原拓也, 泡の構造の形成・消滅シミュレーション, 日本機械学会第 26 回計算力学講演会, 2013/11/2-4, 佐賀大.
4. Takuya Uehara, An atomistic study on nano-scale friction mechanism using molecular dynamics simulation, 12th Int. Conf. on Computational Plasticity, 2013/9/3-5, Technical University of Catalonia, Barcelona, Spain.
5. Takuya Uehara, Phase field simulation of stress distribution in lamellar eutectic structure, The 3rd International Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining, 2013/5/20-23, Lejonalds Slott, Stockholm, Sweden.
6. 上原拓也, ラメラ組織の形成過程と力学特性のフェーズフィールドシミュレーション, 第 62 回理論応用力学講演会, 2013/3/6-8, 東工大.
7. Takuya Uehara, Grain-size equalization model using multi-phase-field model, The 7th International Workshop on Modeling Crystal Growth, 2012/10/28-31, The Grand Hotel, Taipei, Taiwan.
8. 上原拓也, フェーズフィールドシミュレーションによる結晶粒分布の最適化, 日本機械学会第 25 回計算力学講演会, 2012/10-6-9, 神戸ポートアイランド.
9. 上原拓也, マイクロスケール構造の力学応答に関するフェーズフィールドモデリング, 日本機械学会 M&M2010 材料力学カンファレンス, 2012/9/21-24, 愛媛大.
10. 上原拓也, 微視組織内の応力分布と材料特性変化に関するフェーズフィールドモデリング, 日本機械学会第 24 回計算力学講演会, 2011/10/9, 岡山大.

11. 上原拓也, 原子スケール解析による材料の変形メカニズムの解明とモデリング, 日本機械学会東北支部秋季講演会, 2011/9/22, 山形大.
12. 渡邊雅介, 上原拓也, 微細構造をもつ材料の力学特性に関する分子動力学シミュレーション, 日本機械学会東北支部秋季講演会, 2011/9/22, 山形大.
13. 鈴木秀章, 上原拓也, 変形に伴う微視組織変化のフェーズフィールドシミュレーション, 日本機械学会東北支部秋季講演会, 2011/9/22, 山形大.

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

- 出願状況 (計 0 件)
- 取得状況 (計 0 件)

[その他]

ホームページ等

http://uhlab.yz.yamagata-u.ac.jp/uehara_j.html

6. 研究組織

(1)研究代表者

上原 拓也 (Takuya Uehara)

山形大学・大学院理工学研究科・准教授

研究者番号：50311741

(2)研究分担者

井上 達雄 (Tatsuo Inoue)

(平成24年度より追加)

埼玉工業大学・付置研究所・教授

研究者番号：10025950

(3)連携研究者

該当なし