

平成 22 年 6 月 5 日現在

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2008 ～ 2009

課題番号：20760063

研究課題名（和文） 材料の変形挙動と微視組織の形態変化に関する動的連成解析手法の構築

研究課題名（英文） Computational method for dynamic coupling analysis of macroscopic deformation and morphological change in microstructure

研究代表者

上原 拓也（UEHARA TAKUYA）

山形大学・大学院理工学研究科・准教授

研究者番号：50311741

研究成果の概要（和文）： 金属材料の微視組織変化に動的に連成した力学挙動の解析モデルを構築することを目的とし，相，温度および応力／ひずみの変化を連成した数値解析手法の開発を行った．フェーズフィールドモデルを用いることによって，デンドライトや多結晶組織のような複雑な形態をもつ微視組織内部の微視的な応力分布を再現することを可能とした．また，合金系への拡張を行い，局所的な組成変化と相変態および応力の連成解析も可能とした．これにより，一方向凝固過程において形成されるセル状組織内部に複雑な応力変化が現れることを示した．

研究成果の概要（英文）： Computational method is developed using a phase field model which accounts for the coupling effects among phase, temperature and stress/strain, so that the macroscopic behavior of metallic material is described in accordance with the dynamic change in the microstructure. Simulations on microscopic stress distribution in complex microstructure such as dendrites or polycrystals are enabled using the developed method. The equations are then extended for binary alloy system, and the local concentration of each composition is coupled with the phase and stress fields. The subsequent simulation revealed complicated stress is generated in a cellular microstructure formed in directional solidification.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2008 年度	1,900,000	570,000	2,470,000
2009 年度	1,300,000	390,000	1,690,000
年度			
年度			
年度			
総計	3,200,000	960,000	4,160,000

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：連続体力学，結晶成長，計算物理，計算機シミュレーション，相変態，フェーズフィールドモデル，分子動力学，数値解析

1．研究開始当初の背景

金属材料の強度や力学的性質には，微視組

織が大きく影響を与えることが知られている．また，工業製品や構造物の設計には計算

機シミュレーションが多用されており、その解析精度の向上には、材料の力学特性を正確に表現することが必要である。すなわち、微視組織の影響を考慮した力学解析モデルの開発が不可欠となっている。微視組織形成については、デンドライトなどの複雑な形状を再現できるフェーズフィールドモデルによる解析が有効である。この手法は、1990年代に入り計算機の発展とともに急速に広がった手法であり、熱力学的なエネルギー論に基づいた明快な理論体系から、様々な現象の再現に適用されつつある手法である。90年代後半から現在にかけて、微視組織については、多結晶形成や一方向凝固組織、単元系および合金系のデンドライト、スピノーダル分解、共析系の変態組織など、国内外で多くの解析例が発表されている。上原らは、このモデルに応力を連成させ、微視組織形成過程の応力解析を可能とした。すなわち、相の状態を表すフェーズフィールド変数と温度および応力・ひずみの3つの場が互いに連成した基礎式を導出し、微視組織形成過程における応力分布の数値解析を行った。これによって、デンドライトなどの複雑な微視組織内部の応力予測が可能となっている。しかし、現状では、相変態によって発生する応力を単純なモデルで解析しているのみであり、応力誘起による相変態や、微視組織の形状、形態および分布がマクロな材料特性や変形挙動に及ぼす影響などについては十分に考慮できていない。力学および熱的負荷のかかる加工や熱処理過程においては、微視組織の形態そのものが変化しつつ、変形が生じるため、両者を動的に連成した解析が必要とされている。

2. 研究の目的

本研究では、フェーズフィールドモデルを用いた相・温度・応力の連成基礎式に基づく数値解析を主な手法とする。この基礎式については、上述の通り、一応の定式化はできているが、相変態の応力依存性についての検討が不十分である。そこで本研究では、まず応力負荷時の変態挙動をモデル化し、フェーズフィールド方程式への導入を図る。マクロな意味での変態挙動は、Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK)式に対する応力依存項の導入など、多くの文献があるが、微視組織レベルでの依存性は明確ではない。また、実験的にそれらを明確にすることは現状では困難である。そこで本研究では、分子動力学解析なども使い、現象論的ではなく、原子の挙動に基づいた解析から変態モデルを提案し、フェーズフィールド方程式への導入を図る。これによって、外力負荷に対する相変態および微視組織の形態変化の解析を可能とする。一方で、異なる微視組織を有する材料のマクロな特性の相違を明らかにする。これについ

ては、基本的には申請者らがこれまでに導出した基礎式を用いればよいが、複雑な微視組織の影響を考慮するには、従来のモデル領域では不十分であるため、高速大容量の計算機システムを用いた解析を行い、データの整理を行う。最後に、相変態の応力依存性を考慮した基礎式に基づく大規模計算を行うことによって、凝固による微視組織形成→加工による微視組織形態の変化（加工誘起相変態、結晶粒の微細化）→熱処理による微視組織変化（結晶粒の粗大化）を連続的に解析し、これらの一連のプロセスの解析モデルを完成させることを、一連の研究における最終目的とする。

3. 研究の方法

(1) 単元系

本研究で用いるフェーズフィールドモデルの概要を記す。フェーズフィールドモデルとは、固相と液相などの2相の状態を、フェーズフィールド変数とよばれるスカラー変数 ϕ を用いて表し、その値の空間分布および時間変化を微分方程式で表現する方法である。これによって、複雑な形状をもつ固相領域が成長し、デンドライトのような複雑な形状ができあがる過程が再現できる。固相変態における2相問題において、結晶方位を考慮した解析を行う場合には、新しい変数を導入したり、フェーズフィールドをベクトル変数に修正したりする等の工夫が行われるが、最も簡単な変態のみを扱う場合は、基本的に固液モデルと同様である。上原らは、このモデルに応力を連成することによって、微視組織形成過程で内部に発生する応力の変化と、相変態完了後に残される残留応力の解析を行うことを可能とした。導出された連成解析の基礎式は以下のとおりである。

フェーズフィールド方程式：

$$m\dot{\phi} = \nabla \cdot A\nabla\phi + \phi(1-\phi)(\phi - 1/2 + M(\phi, T, \sigma_{ij}))$$

ただし、

$$A = A(\theta) = a \begin{pmatrix} r^2(\theta) & -r(\theta)r'(\theta) \\ r(\theta)r'(\theta) & r^2(\theta) \end{pmatrix}$$

$$r(\theta) = 1 - \delta_r \cos(4\theta)$$

$$M(\phi, T, \sigma_{ij}) = b\phi(1-\phi)\left(L\frac{T_m - T}{T_m} + f(\sigma_{ij})\right)$$

$$f(\sigma_{ij}) = n_1\sigma_{kk} + n_2\sigma_{ij}\sigma_{ij}$$

熱伝導方程式：

$$\rho c \dot{T} = k \nabla^2 T + 30L\phi^2(1-\phi)^2 \dot{\phi} - T\alpha \delta_{ij} \dot{\sigma}_{ij} + \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}^p$$

応力の平衡方程式：

$$\partial \dot{\sigma}_{ij} / \partial x_j = 0$$

ただし，応力 - ひずみ関係式としては，

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \frac{1+\nu}{E} \dot{\sigma}_{ij} - \frac{\nu}{E} \dot{\sigma}_{kk} \delta_{ij} + \dot{\epsilon}_{ij}^p + \alpha \dot{T} \delta_{ij} + 30\beta\phi^2(1-\phi)^2 \dot{\phi} \delta_{ij}$$

とする．ここで， m, a, b は界面幅や界面エネルギーの影響を表すフェーズフィールドパラメータ， θ は界面の法線方向を表す角度， δ_i は異方性の強さを表すパラメータ， $f(\sigma_{ij})$ は相変態の応力依存性を表す関数， n_1, n_2 はパラメータである．また， ρ, c, k, L, T_m は，それぞれ密度，比熱，熱伝導率，潜熱，変態温度， $\sigma_{ij}, \epsilon_{ij}, \epsilon_{ij}^p$ は応力，ひずみ，塑性ひずみ， E, ν, α, β は，それぞれ縦弾性率，ポアソン比，線膨張係数，変態膨張係数である．さらに，これらの材料パラメータに関する界面領域での値 \bar{x} は従来の体積分率を用いた連続体力学モデルに準じて，2相の単相での値 x_1, x_2 を用いた次のような表現を適用している．

$$\bar{x} = (1 - p(\phi)) x_1 + p(\phi) x_2$$

ただし，縦弾性率とポアソン比については，それぞれ，

$$\frac{1}{\bar{E}} = \frac{1 - p(\phi)}{E_1} + \frac{p(\phi)}{E_2}$$

$$\frac{\bar{\nu}}{E} = (1 - p(\phi)) \frac{\nu_1}{E_1} + p(\phi) \frac{\nu_2}{E_2}$$

としている．また， $p(\phi)$ は $\phi=0$ で 1, $\phi=1$ で 1 となる関数であり，例えば

$$p(\phi) = \phi^3 - 15\phi^2 + 6\phi$$

などが適用される．

(2) 2成分合金系

二元合金系の凝固解析の基礎式としては，Warren らによって示された式を用い，Ni-Cu 合金に対するパラメータを用いる．ここに示す以下の式は無次元化された式である．

フェーズフィールド方程式：

$$\tau \dot{\phi} = a^2 \nabla \cdot A \nabla \phi + ((1-c)h_1 + ch_2 + f(\sigma_{ij}))$$

ただし， $A(\theta)$ は前述の通りであり，

$$h_1 = g'(\phi) + 30g(\phi)l_1(T_1^m - T_0)/T_0$$

$$h_2 = g'(\phi) + 30g(\phi)l_2(T_2^m - T_0)/T_0$$

$$g(\phi) = \phi^2(1-\phi)^2$$

である．ここで， τ と a はフェーズフィールドパラメータ， c は Cu の濃度， l は変態潜熱に相当するパラメータ， T_0 は初期温度， T^m は融点であり，下付の記号 1, 2 はそれぞれ Ni と Cu に対する値であることを示している．無次元化した潜熱 l は， $[J/m^3K]$ の次元をもつパラメータ W と，単位体積あたりの変態潜熱 L および融点 T^m を用いると $L/(T^m W)$ 表される．

拡散方程式：

$$\dot{c} = \nabla \cdot D(\nabla c + v_R(h_2 - h_1)c(1-c)\nabla \phi)$$

ただし，

$$D = D_s + p(\phi)(D_l - D_s)$$

である．ここで， D_s, D_l はそれぞれ，固体と液体の拡散係数， v_R は，モル体積 v_m と気体定数 R を用いて $v_m/(RW)$ と表される無次元パラメータである．

応力・ひずみ関係式：

応力の発生源としては，凝固に伴う体積収縮のみを考え，応力の平衡方程式を数値的に解くことによって応力分布を求める．本報では，弾性変形のみを考慮することとし，弾性体に対する構成式を用いる．すなわち，前述のうち ϵ_{ij}^p の項を除いた式を用いることとする．ただし，液相の扱いでは，縦弾性率を十分に小さくすることによって近似する．

4. 研究成果

(1) 微視組織内の応力分布（日本材料学会第 58 期学術講演会講演前刷集 pp. 347-348）

図 1 はフェーズフィールドモデルを用いて計算した微視組織と応力分布である．母相から新相が析出する過程をシミュレートしたものであり，内部には微視組織が形成され，それに応じた複雑な応力分布を生じている．また，最終状態までに相変態は完了して，一様な相となるが，内部には微視組織に対応した残留応力分布が生じている．このモデルでは，応力ひずみ関係に従来の構成式をそのまま適用しているため，微視的な塑性変形や応力を本質的に表しているわけではないが，適切なモデルに改良することで，より妥当な応力分布が求められるであろう．このような微視組織内部の応力分布は，材料全体の巨視的な力学特性に大きく影響すると考えられる．図 2 は体積分率を用いた連成解析によって

行った計算例である．軸対称モデルを用いて高温から冷却する過程をシミュレートしたものであり，材料は鉄鋼材料を想定している．図 2 (a)は冷却後のマルテンサイト分布であり，表面近くのみマルテンサイトが生じる．なお，残りの内部領域はパーライトになっている．図 2 (b)はこのときの軸方向の応力成分を表しており，変態組織に応じて複雑な応力分布が生じていることがわかる．特に表面のマルテンサイト領域に強い圧縮，内部のパーライト領域に引張りの残留応力分布となっており，マルテンサイトの硬さとともに，製品の強度特性に大きく影響している．

フェーズフィールドモデルによる解析に期待されるのは，このようなマクロな相分布において，体積分率のみではなく，微視組織の影響を同時に考慮することである．ただし，現状としては図 1 に示したような解析モデルでは，図 2 のような大きな製品全体の解析は不可能であり，微視領域の解析と全体の解析をリンクした解析モデルの構築を進める必要がある．

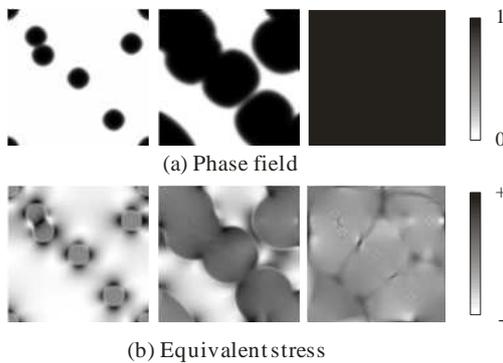


図 1. フェーズフィールドモデルによる微視組織形成と応力分布

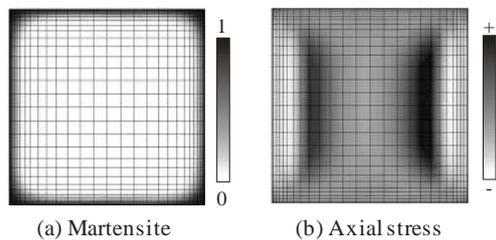


図 2. 体積分率を用いた連続体解析による相変態と応力分布

(2) 相変態の応力依存性 (日本機械学会第 21 回計算力学講演会講演論文集 pp. 404-405)

応力と相変態の連成解析においては，相変態の応力依存性を正確に表現することが必要であり，それが可能であることが本解析手

法の特徴である．そのためには，より詳細な検討と式の改良が必要であるが，本研究では，従来モデルに基づいた解析を行った．すなわち，3-(1) 項に示した式中の $f(\sigma)$ の効果について検討した．

図 3 に，一定応力を負荷した状態での相変態解析の結果を示す．変態膨張係数は正の値とし，母相 ($\phi=0$) から析出相 ($\phi=1$) への変態によって，体積は膨張すると仮定している．また $f(\sigma)$ については，簡単のため n_1 のみを考慮し，正の値を与える．つまり，正の応力値をもつときに変態が促進され，逆に負の応力下では変態の進行が抑制されることになる．これによって，体積膨張を起こす変態の起こりやすさを表現している．初期状態として，図 3 (a)(i) に示すように， $x=0.5$ を中心とする帯状の析出相が現れている状態を考える．モデル全体に一樣な引張り応力を付加すると変態が速やかに進行するのに対し，一樣な圧縮応力下では変態の進行は逆に進行して析出相が消失することを確認しているが，ここでは，その効果を同時に示すため，図 3 (b)(i) に示すように，モデル内に縞状の応力分布を与えた場合を考える．図 3 (ii), (iii) はそれぞれ 700step, 1400step における分布であり，引張り応力の負荷された領域では変態が進行するのに対し，圧縮応力の領域では逆変態が進行し，最終的には図 3 (a)(iii) に示すような微視組織が形成される．このように，このモデルでも一定応力下での相変態が表現できている．

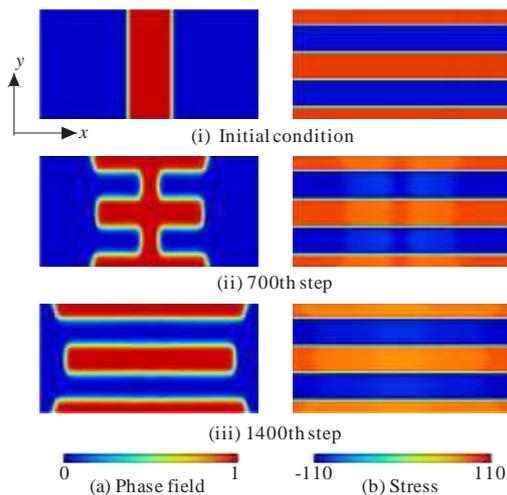


図 3. 相変態の応力依存性を考慮したフェーズフィールドモデル解析

(3) セル状組織内部の応力分布 (日本機械学会第 22 回計算力学講演会講演論文集 #1108)

図 4 は，温度 $T = 1574$ K，初期濃度 $c = 0.4083$ とし，結晶の初期核を左側面境界上に

5 個配置したときのシミュレーション結果であり，図 (a), (b) はそれぞれ Cu 濃度と応力の x 成分の時間変化を表している．境界条件としては，右側の境界は自由境界とし，その他の境界は固定境界とする．また，フェーズフィールドと濃度の境界条件は勾配が 0 となるように設定する．解析対象の領域は $320 \Delta x \times 80 \Delta x$ とする．数値解析には， ϕ と c に対しては差分法，応力解析は有限要素法を用い，前者の格子点と後者の節点に対応するように設定する．解析に用いたパラメータを表 1 に示す．ただし，液相については， $E_l=1.0e-09$, $\nu_l=0.5$ とする．

左側面に設定した結晶核から，凝固が進展し，成長初期段階では，固液界面の先端は波状の形状を示す．このとき，界面付近に Cu 成分が濃縮され，図 4 (a) に示すように，固相内には縞状の濃度分布が現れる．Cu 濃度が高くなるにつれて凝固速度が低下するため，やがて成長が止まるセルが現れ，隣接するセルに吸収される．このとき，成長の止まったセルの先端部には，液滴が残される場合がみられる．また，セル数が少なくなると，セル間に液相の深い溝が形成される．

このような一連の成長過程においては，図 4 (b) に示すように，固相内には複雑な応力分布が現れる．凝固に伴って体積収縮が起こると， y 方向には境界条件として変位を拘束しているため，全体的に引張りの応力が生じる．セル間に液相の溝が形成されると，液相部の存在のために y 方向の拘束は低減され，固相部においてもバルクの固相部ほどの応力は生じない．また， x 方向には片面を自由境界としているため，全体的には応力が生じない．しかし，液滴や液相の溝が形成されると，その周辺には応力集中がみられ，大きな応力値と複雑な分布が発生する．

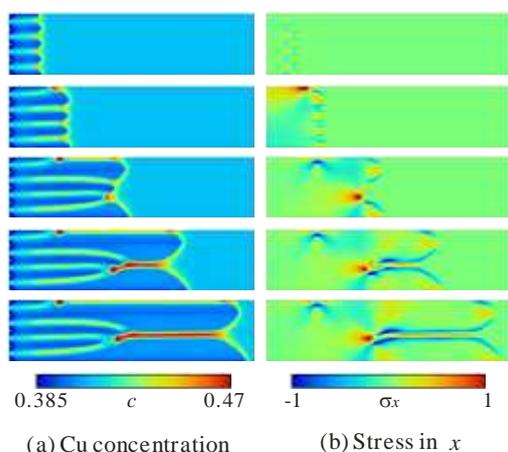


図 4. 一方向凝固過程におけるセル状組織形成と応力分布

(4) まとめ

金属材料の微視組織変化に伴う応力変化を解析することが可能な数値解析モデルを構築するため，フェーズフィールドモデルに応力を連成させることによって，相，温度および応力/ひずみの連成効果を考慮した数値解析手法の開発を行った．これにより，デンドライトや多結晶組織内の微視的な応力分布の解析が可能となった．また，相変態の応力依存性を考慮することによって，巨視的な力学特性への影響を考慮することが可能なモデリングとなっているといえる．さらに合金系への拡張を行い，多種多様な微視組織を対象とすることが可能となった．以上のように，本研究によって，材料の変形挙動と微視組織の形態変化に関する動的連成解析の基礎的な枠組みが構築できた．

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計 5 件)

Takuya Uehara, Numerical study on the evolution of stress distribution in cellular microstructures, International Journal of Materials Research, 査読有, Vol. 101, 2010, pp. 486-491.

Takuya Uehara, Evaluation of the stress distribution in a cellular microstructure using a phase field model, Journal of Crystal Growth, 査読有, Vol. 312, 2010, pp. 1425-1428.

上原拓也, 一方向凝固におけるセル状組織形成と応力分布のフェーズフィールドシミュレーション, 日本計算工学会論文集, 査読有, Vol. 2009, 2009, #20090023 (6 pages).

上原拓也, 福井基支, 大野信忠 フェーズフィールドモデルによる凝固組織形成と応力分布の数値解析, 材料, 査読有, Vol. 57, 2008, pp. 231-236.

Takuya Uehara, Motoshi Fukui, and Nobutada Ohno, Phase field simulations of stress distributions in solidification structures, Journal of Crystal Growth, 査読有, Vol. 310, 2008, 1331-1336.

[学会発表](計 7 件)

上原拓也, フェーズフィールドモデルによる二相界面の力学的安定性, 日本材料学会第 59 期学術講演会, 2010/5/23, 札幌市.

上原拓也, セル状組織形成過程のフェーズフィールドシミュレーション, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 2009/10/10, 金沢市.

Takuya Uehara, Phase field simulation of microscopic stress distribution in complex microstructures, The 10th International

Conference on Computational Plasticity,
2009/9/3, Barcelona, Spain.

上原拓也，フェーズフィールドモデルによる微視領域の相変態と巨視的応力，日本材料学会第 58 期学術講演会，2009/5/24，松山市．

上原拓也，一定応力下における相変態現象に関するフェーズフィールドモデル解析，日本機械学会第 21 回計算力学講演会，2008/11/2，中頭郡西原町．

Takuya Uehara, An application of the phase field model to numerical simulation of stress distribution in microstructures, The 8th International Seminar on Geometry Continua and Microstructures, 2008/10/11, Catania, Italy.

高橋秀徳，上原拓也，多結晶組織形成の分子動力学シミュレーション，日本機械学会東北支部第 44 期秋季講演会，2008/9/27，弘前市．

〔その他〕

ホームページ等

<http://uhl-lab.yz.yamagata-u.ac.jp/uehara>

6．研究組織

(1)研究代表者

上原 拓也 (UEHARA TAKUYA)

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

なし

(3)連携研究者

なし