

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年 5月11日現在

機関番号：82110

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2009～2011

課題番号：21560101

研究課題名（和文）保存則に基づくマルチスケール・フェーズフィールドモデルと再結晶シミュレーション

研究課題名（英文）Multiscale Phase-field Model Based on Conservation Laws and Recrystallization Simulation

研究代表者

青柳 吉輝（AOYAGI YOSHITERU）

独立行政法人日本原子力研究開発機構・原子力基礎工学研究部門・研究員

研究者番号：70433737

研究成果の概要（和文）：エネルギー原理と等価な保存則に基づいて Phase-field モデルを構築した。その際、基礎となる保存則は、結晶格子スケールの微視的物理量に基づいて導出した。構築した Phase-field モデルを用いて静的再結晶シミュレーションを実施した。さらに、Multi-phase-field モデルと転位-結晶塑性モデルを連成させ、転位蓄積による核生成を考慮した動的再結晶モデルを構築した。

研究成果の概要（英文）：A phase-field model is constructed from conservation laws corresponding to the energy principle. The conservation laws are derived by microscopic physical quantities on the crystal lattice scale. A static recrystallization phenomenon is calculated by the presented model. Moreover, coupling the multi-phase-field model and the dislocation-crystal plasticity model, we construct a dynamic recrystallization model considering nucleation based on dislocation accumulation.

交付決定額

（金額単位：円）

|        | 直接経費      | 間接経費      | 合計        |
|--------|-----------|-----------|-----------|
| 2009年度 | 1,300,000 | 390,000   | 1,690,000 |
| 2010年度 | 1,200,000 | 360,000   | 1,560,000 |
| 2011年度 | 1,100,000 | 330,000   | 1,430,000 |
| 年度     |           |           |           |
| 年度     |           |           |           |
| 総計     | 3,600,000 | 1,080,000 | 4,680,000 |

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：再結晶，フェーズフィールド，結晶塑性解析，マルチスケール

## 1. 研究開始当初の背景

高強度・高延性・高靱性等の優れた材料特性を有する金属材料創製に向け、より本質論的立場からの材料組織形成シミュレーションに大きな期待が寄せられている。その一例としては、計算材料科学と計算固体力学をブリッジするマルチスケール解析が注目を集めている。同時に、相転移における各相を一つの連続関数として表すことが可能な

Phase-Field 法が近年盛んに用いられている。これまでに申請者は、このようなマルチスケール手法として転位-結晶塑性論と Phase-Field 法を用い、回復、核生成および核成長という3段階からなる再結晶成長過程を再現することを試みてきた。しかしながら、再結晶解析に用いられる従来の KWC 形 Phase-Field 方程式は Ginzburg-Landau 形汎関数の変分によって得られるため、流束の概念を有しない

汎関数を基礎としており、相状態を表す複数の変数が存在する場合、それらの連成を流束の構成式レベルで議論することが困難になる。また、結晶方位に対する Phase-Field 方程式がいかなる保存則と等価であるかは不明であり、同方程式に登場する材料係数の秩序変数および結晶方位依存性などをモデル化する際に、熱力学的あるいは数理的根拠を与えることができない。さらに、従来の KWC モデルは放物形方程式であるため、母相と再結晶相の情報が無限の伝ば速度で瞬時に界面へ伝達するという放物形方程式に特有の致命的問題を有している。このような問題を解決するためには、Phase-Field 方程式を保存則から導出し直すとともに、諸流束の連成を考慮して各流束の構成式を熱力学的に構築する必要がある。一方、強加工過程ではしばしば動的再結晶現象の解明が重要になるが、そのためには転位組織形成、再結晶核生成・核成長および結晶の塑性変形を連成させてモデリングを行う必要がある。ところが、そのようなモデルは提案されていないのが現状である。

## 2. 研究の目的

結晶格子オーダーの離散量に対する保存則を代表体積要素内で加算平均し、代表体積要素を連続体の一物質点に収束させることで、再結晶現象に対する質量、運動量、角運動量、エネルギーの保存則およびエントロピー増大則を定式化する。次に、静的再結晶問題に対する秩序および結晶方位の発展を支配する釣合い方程式をそれぞれ再結晶相の体積分率で表現した質量保存則および結晶格子の回転に対する角運動量保存則から導出する。また、得られた方程式に基づいて相転移の非平衡熱力学体系に整合するよう、秩序変数と結晶方位の連成を考慮した秩序流束および方位流束の構成式を導出することで、再結晶問題に対する新たな Phase-Field モデルを構築する。さらに、それらを用いた静的再結晶シミュレーションを実施し、従来の KWC モデルから得られる結果と比較・検討する。次に、それを動的再結晶問題へと拡張する。角運動量方程式に応力や偶応力の影響が導入される可能性がある場合も応力の対称性が保たれるようにスケール(結晶格子スケール、結晶粒スケール)ごとに角運動量方程式を分離することによって方位発展を表す Phase-Field 方程式を導出する。さらに、得られた相転移場を支配する Phase-Field 方程式、転位組織形成を表す反応-拡散方程式および変形場を支配する結晶塑性方程式を連動させたマルチスケールモデリングを行うとともに、それらを用いて動的回復、核生成および核成長を統一的に再現可能な動的再結晶シミュレーションを試みる。

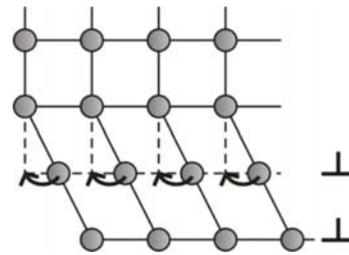


Fig. 1 Rotation of lattice

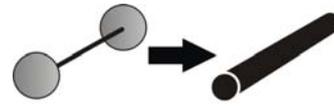


Fig. 2 Lattice element

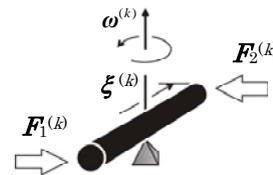


Fig. 3 Couple acting on lattice element

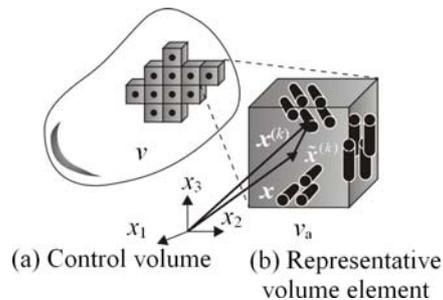


Fig. 4 Discrete model

## 3. 研究の方法

### (1) 代表体積要素を基準とする保存則

静的再結晶過程にある材料の再結晶相-母相界面においては、蓄積転位による格子の乱れと原子の熱振動によって原子間力の釣合いが一部損なわれ、原子が安定位置に移ろうとして結晶格子は図1のように回転する。そこで本研究では、図2のように両端にそれぞれ原子を1つずつ有する格子ユニットを、それと等価な質量をもつ弾性棒としての格子要素でモデル化する。さらに、図3のような格子要素を内部に多数有する代表体積要素 (RVE) を考える(図4)。格子のスピン運動を考慮したこのようなモデルに基づき、単相における RVE を基準とした質量、運動量、バルクの角運動量、格子の角運動量およびエネルギー保存則を導出する。

### (2) 相 $p$ に対する連続体としての保存則

(1)にて定式化した単相に対する結晶格子スケールの離散的保存則における RVE の極限を取ることによって、連続体に対する積分形の保存則を求める。得られた保存則を通常の手順で局所化することによって、単層に対する連続体としての保存則を導出する。

### (3) 混相に対する保存則

局所形の保存則を相にわたって和を取るとともに平均化操作を実施することによって、混相に対する保存則を導く。このとき、単相に対する各保存則の非定常項を複数の相にわたって加算平均するための有用な定理を導出する。

### (4) エントロピー増大則

得られた諸保存則に基づいて、混相に対するエントロピー増大則に単層に対する輸送定理および Gauss の発散定理を適用し、得られた結果を局所化することによって、エントロピー増大則を定式化する。得られたエントロピー増大則に非定常項の混合に対する定理を適用し、得られた結果を整理することによって、エントロピー増大則の局所形を導出する。

### (5) 釣合い方程式

(3)の過程で得られる単相に対する質量保存則に秩序変数を導入し、秩序変数に対する釣合い方程式を求める。また、結晶方位を用いて混相に対するスピン角運動量保存則を表示することによって、結晶方位に対する釣合い方程式を導出する。

### (6) 構成式の導出

熱力学的検討を行い、反応拡散系の非平衡熱力学体系に基づいて、エントロピー増大則から、秩序変数および結晶方位の流束に対する構成式を導出する。

### (7) Phase-field 方程式系

(6)で得られた流束の構成式を釣合い方程式に代入して、基礎方程式を得る。得られた秩序方程式の質量湧き出し項を反応速度式で表記するとともに、方位方程式の拡散係数を粒界エネルギーの時間変化と同期させることで具体化する。さらに方位方程式の保存部分を無視して時間で1回積分すれば3次元化された KWC 形 Phase-field 方程式が導出されることを示す。得られたモデルを2次元化し、従来の KWC 形 Phase-field モデルへと帰着することを確かめる。構築した Phase-field モデルを用いて静的再結晶シミュレーションを実施する。

### (8) 動的再結晶シミュレーション

Multi-phase-field モデルと転位-結晶塑性モデルを連成させ、核成長と変形にともなう転位密度変化を結晶の硬化係数に反映させる。蓄積した転位密度に立脚した核生成のクライテリアを設け、変形過程における核生成を考慮した動的再結晶モデルを構築する。さらに、本モデルに基づいてマルチフィジックス解析を行う。粒界等の高転位密度サイトに生成された再結晶核に対して、Phase-field 解析を行えば、転位の蓄積エネルギー差が駆動力となって再結晶核が成長を開始する。このとき、母相が新相へと変化した領域では、転位密度およびすべり値を初期化する。核成長

解析から得られた情報を結晶塑性有限要素法に与え、変形解析を実施する。更新された転位密度を差分格子点に戻し、再度核成長解析を行う。また、転位密度に立脚した核生成のクライテリアとして、臨界転位密度  $\rho_c$  を定義し、 $\rho_c$  に達した一つの有限要素の重心から臨界核半径  $r_c$  内に存在する有限要素がほぼ臨界転位密度  $\rho_c$  を満たしていれば、その領域を再結晶核とする。本研究では、転位-結晶塑性モデルは FEM を用い、Multi-phase-field モデルは FDM を用いて FEM-FDM ハイブリット解析を行う。解析から得られた微視組織の発展とマクロな応力-ひずみ曲線の増減との関係を考察する。

## 4. 研究成果

### (1) 保存則に基づく Phase-field 方程式

結晶格子スケールにおける相  $p$  の RVE を基準とした質量、運動量、バルクの角運動量、格子の角運動量およびエネルギー保存則が次式のように定式化される。

$$\frac{d}{dt} \sum \rho_p v_a = \sum \tilde{b}_p v_a \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum \rho_p v_p v_a \\ = \sum \left( \sum_n^{(n)} t_p a_a + \tilde{p}_p v_a + \tilde{b}_p v_p v_a \right) \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum \rho_p (\mathbf{x} \times \mathbf{v}_p + \boldsymbol{\sigma}_p) v_a \\ = \sum \left[ \sum_n^{(n)} (\mathbf{x} \times \mathbf{t}_p + \mathbf{n}_p) a_a \right. \\ \left. + (\mathbf{x} \times \tilde{p}_p + \tilde{\mu}_p + \tilde{l}_p) v_a \right. \\ \left. + \tilde{b}_p (\mathbf{x} \times \mathbf{v}_p + \boldsymbol{\sigma}_p) v_a \right] \end{aligned} \quad (3)$$

$$\frac{d}{dt} \sum \rho_p s_p v_a = \sum \left( \sum_n^{(n)} m_p a_a + \tilde{b}_p s_p v_a \right) \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum \rho_p \left( \varepsilon_p + \frac{1}{2} \mathbf{v}_p \cdot \mathbf{v}_p + \frac{1}{2} \mathbf{s}_p \cdot \boldsymbol{\omega}_p \right) v_a \\ = \sum \left[ \sum_n^{(n)} (\mathbf{t}_p \cdot \mathbf{v}_p + \mathbf{m}_p \cdot \boldsymbol{\omega}_p + q_p) a_a \right. \\ \left. + (\mathbf{v}_p \cdot \tilde{p}_p + \boldsymbol{\omega}_p \cdot \tilde{l}_p + \tilde{\varepsilon}_p) v_a \right. \\ \left. + \tilde{b}_p \left( \varepsilon_p + \frac{1}{2} \mathbf{v}_p \cdot \mathbf{v}_p + \frac{1}{2} \mathbf{s}_p \cdot \boldsymbol{\omega}_p \right) v_a \right] \end{aligned} \quad (5)$$

ここで、 $v_a$  および  $a_a^{(n)}$  はそれぞれ六面体 RVE の体積および6つの表面のうちの  $n$  番目の表面積であり、 $\Sigma$  は RVE 内での平均値の検査体積  $v$  にわたる和を表している。また  $\rho_p$ 、 $\mathbf{v}_p$ 、 $\boldsymbol{\sigma}_p$ 、 $\mathbf{s}_p$ 、 $\varepsilon_p$  および  $\boldsymbol{\omega}_p$  は、それぞれ RVE 内で平均化された相  $p$  の密度、速度、単位質量あたりの公転角運動量、単位質量あたりのスピン角運動量、内部エネルギーおよびスピン角速度である。また、 $\mathbf{t}_p$ 、 $\mathbf{n}_p$ 、 $\mathbf{m}_p$  および  $q_p^{(n)}$  はそれぞれ  $n$  番目の表面積に働く表面力、公転のための表面偶応力、スピンのための表面

偶応力および単位時間あたりに同表面から供給される単位面積あたりの熱である。一方、 $\hat{b}_p$ ,  $\hat{p}_p$ ,  $\hat{\mu}_p$ ,  $\hat{l}_p$  および  $\hat{\varepsilon}_p$  はそれぞれ RVE 内で平均化された質量湧き出し、相互作用運動量、格子のモーメントアーム  $\hat{x}^{(k)}$  と相互作用運動量  $\hat{p}_p^{(k)}$  が形成する相互作用角運動量、相互作用角運動量および相互作用エネルギーである。この段階で得られる諸保存則の形式は、マイクロポーラー体の保存則のようにも見えるが、実際の使用時には代表体積要素の大きさを無限小に収束させるため、通常の単純体の物質点に結晶方位の情報が付随したディレクタモデルであるとみなすことができる。また、質量湧き出しと任意の量の積を代表体積要素内で加算平均すると、質量湧き出しの体積平均と任意の量の質量平均の積として記述できる。したがって、任意の量の質量平均からのゆらぎと質量湧き出しの積は、代表体積要素内で和をとることによって零となる。一方、角運動量保存則について、巨視的スケールおよび結晶格子スケールの代表長さを定義し、それらを用いてオーダー評価を行うと、角運動量保存則はバルク部分と格子部分に分離できる。上記の離散的保存則に対し、代表体積要素を連続体の一物質点に帰着させ、通常の手順で局所化するとともに、局所形の保存則を相にわたって和を取り、平均化を施すと、混相の保存則が次式のように得られる。

$$\dot{\rho} + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \quad (6)$$

$$\rho \dot{\mathbf{v}} = \operatorname{div} \mathbf{T} \quad (7)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T \quad (8)$$

$$\rho \dot{\mathbf{s}} = \operatorname{div} \mathbf{M} \quad (9)$$

$$\rho \dot{\varepsilon} = -\operatorname{div} \mathbf{q} + \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{M} \cdot \dot{\mathbf{A}} \quad (10)$$

ここで、 $\rho = \Sigma \rho_p$  は質量密度、 $\mathbf{v}$  は物質速度、 $\mathbf{T}$  は Cauchy 応力、 $\mathbf{s}$  は格子のスピン角運動量密度、 $\mathbf{M}$  は偶応力、 $\varepsilon$  は内部エネルギー密度、 $\mathbf{q}$  は熱流束、 $\mathbf{D}$  は変形速度および  $\mathbf{A}$  は方位こう配： $\mathbf{A} = \operatorname{grad} \boldsymbol{\theta}$  である。混相に対する質量および運動量の保存則は、いずれも単純体に対するものと形式上一致する。一方、再結晶相(単相)の質量保存則において、密度を体積分率で表示し直すと、秩序変数  $\phi$  に対する釣合い方程式が

$$\dot{\phi} = -\operatorname{div} \mathbf{j}_\phi + b_\phi \quad (11)$$

のように得られる。ここで、 $\mathbf{j}_\phi = \rho_p \hat{\mathbf{v}}_p / \rho$  および  $b_\phi = \hat{b}_p / \rho$  である。秩序変数の釣合い方程式は再結晶相の体積分率を秩序変数として表示した質量保存則と等価である。バルクの角運動量保存則からは単純体の角運動量方程式が得られ、混相の Cauchy 応力は対称性を保つ。格子の角運動量方程式からは次式に示す結晶方位に対する Phase-field 方程式に相当する発展式が導出される。

$$\mathbf{J}\ddot{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\Omega}\dot{\boldsymbol{\theta}} = \operatorname{div} \mathbf{I}_\theta \quad (12)$$

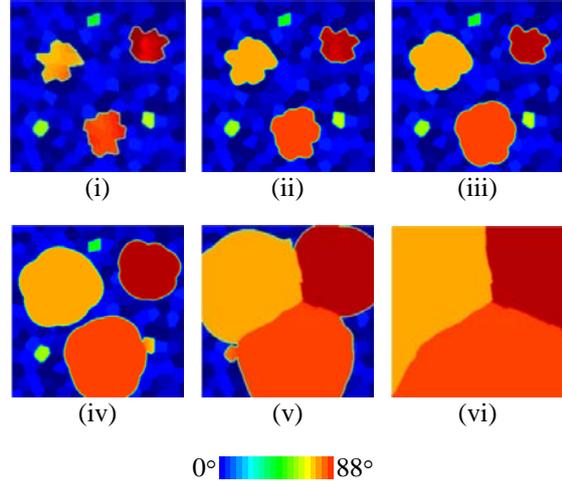


Fig. 5 Temporal change of crystal orientation during nucleus growth (Time [s]: (i) 5, (ii) 220, (iii) 450, (iv) 720, (v) 1200, (vi) 2460)

ここで、 $\mathbf{J} \equiv (\operatorname{tr} \mathbf{I}) \mathbf{I} - \mathbf{I}$  は慣性モーメントテンソル、 $\mathbf{I}$  は  $\mathbf{I} \equiv \langle \boldsymbol{\zeta}^{(k)} \otimes \boldsymbol{\zeta}^{(k)} \rangle_m$  および  $\boldsymbol{\theta}$  は結晶方位角であり、 $\boldsymbol{\Omega} \equiv \operatorname{dual} \boldsymbol{\omega}$  および  $\mathbf{I}_\theta \equiv \mathbf{M} / \rho$  はそれぞれスピン角速度テンソルおよび方位流束テンソルである。さらに、得られた諸保存則からエントロピー増大則が定式化される。混相のエネルギー保存則およびエントロピー増大則を定式化すると、混相における相転移のエントロピー流束は化学ポテンシャルと相対質量流束を用いて定義できる。エントロピー増大則から秩序流束および方位流束の構成式が熱力学的に導出され、得られた構成式を釣合い方程式に代入することによって基礎方程式系が

$$\dot{\phi} = a_\phi \nabla^2 \phi + b_\phi(\phi) \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}\ddot{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\Omega}\dot{\boldsymbol{\theta}} \\ = \operatorname{div} \{ [\bar{a}_{\theta c 0} (\operatorname{tr} \mathbf{A}) \mathbf{I} + \bar{a}_{\theta c} \mathbf{A} + \bar{a}'_{\theta c} \mathbf{A}^T] \\ + (a_{\theta d 0} \mathbf{I} + a_{\theta d} \dot{\mathbf{A}} + a'_{\theta d} \dot{\mathbf{A}}^T) \} \end{aligned} \quad (14)$$

のように得られる。ここで、 $a_\phi$ ,  $a_{\theta d 0}$ ,  $a_{\theta d}$  および  $a'_{\theta d}$  は  $\phi$ ,  $\dot{\phi}$ ,  $\mathbf{A}$ ,  $\dot{\mathbf{A}}$  および  $\operatorname{grad} \phi$  の関数である。秩序変数の支配方程式(13)における質量湧き出しを反応速度式で、結晶方位の支配方程式(14)における拡散係数を粒界エネルギーの時間変化と同期させることで具体化すれば、秩序変数および結晶方位に対する Phase-field 方程式が求まる。本理論において得られる方位方程式は双曲型方程式および放物型方程式の和として表わされるが、再結晶現象を散逸過程のみと見なし、同方程式を時間で1回積分すれば、3次元化された放物型の方位方程式が得られる。得られた3次元 Phase-field モデルを2次元化することで、従来の KWC 形 Phase-field モデルに帰着することが示される。静的再結晶に対する Phase-field モデルを保存則から構築する場合、物質を単純体として捉えるには無理があり、

結晶格子を一種のディレクタとみなす一般化連続体としてモデル化するのが望ましい。得られた Phase-field モデルに基づき、核生成潜伏期間および臨界核半径を考慮した数値解析を実行した(図 5)。本モデルによって、核生成および核成長を同時に考慮した静的再結晶現象を再現することが可能となる。

## (2) 再結晶シミュレーション

動的再結晶問題に用いる Multi-phase-field モデルでは、結晶粒ごとの秩序変数を用いて多数の核成長を同時に解析する。結晶粒  $\alpha$  の秩序変数を  $\phi^\alpha$  ( $0 \leq \phi^\alpha \leq 1$ ) とし、 $\psi^{\alpha\beta} \equiv \phi^\alpha - \phi^\beta$  のように定義される Interface field および  $\sum_{\alpha=1}^N \phi^\alpha = 1$  を考慮すれば、

$$\frac{\partial \phi^\alpha}{\partial t} = - \sum_{\beta=1}^N \frac{M_\phi^{\alpha\beta}}{N} \sum_{\gamma=1(\gamma \neq \alpha)}^N \left\{ \frac{1}{2} (\alpha^{\alpha\gamma^2} - \alpha^{\beta\gamma^2}) \nabla^2 \phi^\gamma + \frac{\partial f(\phi^\alpha, \phi^\gamma)}{\partial \phi^\alpha} - \frac{\partial f(\phi^\beta, \phi^\gamma)}{\partial \phi^\beta} \right\} \quad (15)$$

が得られる。ここで、 $N$  は総結晶粒数、 $M_\phi^{\alpha\beta}$  は相  $\alpha$ - $\beta$  間の易動度および  $\alpha^{\alpha\beta}$  は相  $\alpha$ - $\beta$  間の配係数である。一方、Bulk の自由エネルギー  $f(\phi^\alpha, \phi^\beta)$  には、転位の蓄積エネルギーを粒成長の駆動力とする

$$f(\phi^\alpha, \phi^\beta) = \{1 - p(\phi^\alpha, \phi^\beta)\} f_d(\rho) + W^{\alpha\beta} q(\phi^\alpha, \phi^\beta) \quad (16)$$

を用いる。ここで、 $W^{\alpha\beta}$  は相  $\alpha$ - $\beta$  間のエネルギー障壁である。また、 $f_d(\rho)$  は相  $\alpha$ - $\beta$  間の蓄積エネルギー差であり、相  $\alpha$ - $\beta$  間の局所蓄積エネルギー  $f_d(\rho) = E_s^{\alpha\beta} = E_s^\alpha - E_s^\beta$  と表される。また、 $\{1 - p(\phi^\alpha, \phi^\beta)\}$  および  $q(\phi^\alpha, \phi^\beta)$  はそれぞれ

$$\{1 - p(\phi^\alpha, \phi^\beta)\} = \left( \frac{2}{e} \phi^\alpha e^{\phi^\alpha} e^{\phi^\beta} - \frac{2}{e} e^{\phi^\alpha} e^{\phi^\beta} + 3 \right) \phi^{\beta^2} \quad (17)$$

$$q(\phi^\alpha, \phi^\beta) = \phi^{\alpha^2} \phi^{\beta^2} \quad (18)$$

となる。

結晶塑性モデルにおける硬化則には Pan-Rice 形のすべり速度硬化則:

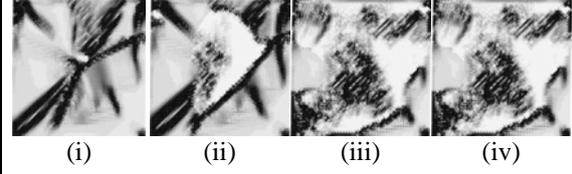
$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0^{(k)} \operatorname{sgn}(\tau^{(k)}) \left| \tau^{(k)} / g^{(k)} \right|^{1/m} \quad (19)$$

を用いる。ここで、 $\dot{\gamma}_0^{(k)}$  は参照すべり速度、 $\tau^{(k)}$  は分解せん断応力、 $g^{(k)}$  は流れ応力および  $m$  はひずみ速度感度指数である。流れ応力  $g^{(k)}$  の発展式および硬化係数  $h^{(k)}$  はそれぞれ次式のように表される。

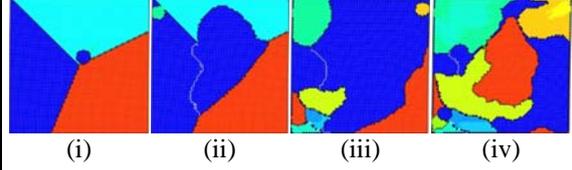
$$\dot{g}^{(k)} = \sum_\lambda h^{(k\lambda)} \left| \dot{\gamma}^{(\lambda)} \right| \quad (20)$$

$$h^{(k\lambda)} = ac\mu\Omega^{(k\lambda)} / (2L^{(\lambda)} \sqrt{\rho^{(\lambda)}}) \quad (21)$$

ここで、 $\mu$  は横弾性係数、 $a$  および  $c$  は 0.1 および 1 のオーダーの数値係数である。また、 $\Omega^{(k\lambda)}$  は各すべり系間の転位相互作用行列、 $L^{(\lambda)}$  は転位の平均飛行距離および  $\rho^{(\lambda)}$  は  $\lambda$  すべり系に蓄積した転位密度である。転位の平均飛行距離には転位密度依存形モデルを用



(a) Dislocation density  
( $0.001 \mu\text{m}^{-2}$  to  $10 \mu\text{m}^{-2}$ )



(b) Crystal orientation ( $0^\circ$  to  $90^\circ$ )

Fig. 6 Temporal distributions of dislocation density and crystal orientation (Elongation percentage [%]: (i) 0.73, (ii) 1.06, (iii) 1.45, (iv) 1.96)

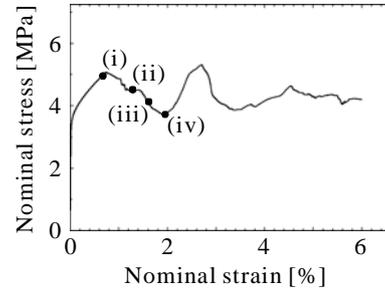


Fig. 7 Nominal stress-strain curve

いる。また、転位密度の定義には、初期転位密度  $\rho_0^{(k)}$ 、GN 転位密度テンソルのノルム  $\rho_G^{(k)}$ 、GN 不適合度テンソルのノルム  $\rho_\eta^{(k)}$  および対消滅を起こした転位密度  $\rho_R^{(k)} = 4f\gamma_c^2 \rho_\eta^{(k)^2}$  を用いて次のように表される全転位密度を採用する。

$$\rho^{(k)} = \rho_0^{(k)} + \rho_G^{(k)} + \rho_\eta^{(k)} - \rho_R^{(k)} \quad (22)$$

上述の転位-結晶塑性モデルと Multi-phase-field モデルとを連成させて動的再結晶解析を行った。解析対象は  $H \times L = 40 \mu\text{m} \times 40 \mu\text{m}$  のアルミニウム平板とし、上端に 10% の強制せん断変位を与えた。数値解析より得られた転位密度および結晶方位分布の時間変化を図 6 に示す。図 6(a)(i) から粒界付近で転位が顕著に蓄積しているのがわかる。同時に、図 6(b)(i) から高転位密度サイトとなる三重点において新たな結晶粒が生成されている様子わかる。また、図 6(a)(ii), (iii) および (b)(ii), (iii) から、再結晶核は転位の蓄積が顕著な粒界に沿って成長しており、転位密度分布に応じた再結晶現象が表現できていることがわかる。さらに変形が進行した図 6(a), (b)(iv) 左下の領域においては、成長した核の粒界付近に新たな高転位密度サイトが形成され、副次的な生成核が発現している様子わかる。一方、図 7 は解析で得られた応力-ひずみ線図であ

る。変形による転位蓄積に依存した硬化および粒成長による動的再結晶に依存した軟化を繰り返す挙動が再現されており、副次的な再結晶核の生成および成長が起こることによって、複数回のピークが発現する。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 11 件)

1. 村松眞由, 青柳吉輝, 志澤一之, 再結晶現象における結晶核と母相に対する混相理論としての保存則の定式化, 日本機械学会論文集, 2012, 掲載決定, 査読有
2. Aoyagi, Y., Shimokawa, T., Shizawa, K. and Kaji, Y., Simulation on Nanostructured Metals Based on Multiscale Crystal Plasticity Considering Effect of Grain Boundary, Materials Science Forum, Vols.706-709, 2012, 1751-1756, 査読有
3. 村松眞由, 青柳吉輝, 志澤一之, 再結晶現象に対する結晶格子スケールの離散的保存則の定式化, 日本機械学会論文集, Vol.77, No.780, A, 2011, 1304-1319, 査読有
4. 青柳吉輝, 小林遼太郎, 志澤一之, 転位パターンニングに基づく結晶粒超微細化に関するマルチスケール結晶塑性シミュレーション, 日本機械学会論文集, Vol.77, No.775, A, 2011, 448-461, 査読有
5. 村松眞由, 味岡秀恭, 青柳吉輝, 只野裕一, 志澤一之, サブグレインからの核生成と核成長に関する静的再結晶 Phase-Field シミュレーション, 材料, Vol.59, No.11, 2010, 853-860, 査読有

[学会発表] (計 21 件)

1. 長津輝, 佐藤慎一, 村松眞由, 青柳吉輝, 志澤一之, 転位蓄積による核生成を考慮した Multi-phase-field 動的再結晶シミュレーション, 第 55 回日本学術会議材料工学連合講演会, 2011 年 10 月 19 日, 京都
2. Muramatsu, M., Sato, S., Aoyagi, Y. and Shizawa, K., A Dynamic Recrystallization Simulation Based on Phase-field and Dislocation-crystal Plasticity Models, XI International Conference on Computational Plasticity Fundamentals and Applications, 2011 年 9 月 8 日, Barcelona
3. 村松眞由, 青柳吉輝, 只野裕一, 志澤一之, 再結晶相の方位変化を考慮した転位-結晶塑性モデルおよび Phase-field モデルによる動的再結晶シミュレーション, 日本材料学会第 60 期学術講演会, 2011 年 5 月 26 日, 大阪

4. 村松眞由, 志澤一之, 核生成を考慮した核成長に関する Phase-field シミュレーション, 日本鉄鋼協会第 161 回春期講演大会, 2011 年 3 月 26 日, 東京
5. 長津輝, 佐藤慎一, 村松眞由, 青柳吉輝, 志澤一之, Multi-phase-field 理論および転位-結晶塑性論に基づく動的再結晶に関するマルチフィジックスモデルとそのシミュレーション, 日本機械学会関東支部第 17 期総会講演会, 2011 年 03 月 26 日, 横浜
6. 佐藤慎一, 村松眞由, 青柳吉輝, 志澤一之, Multi-Phase-Field モデルおよび転位-結晶塑性モデルに基づく動的再結晶シミュレーション, 第 54 回日本学術会議材料工学連合講演会, 2010 年 10 月 25 日, 京都
7. 村松眞由, 青柳吉輝, 志澤一之, 核生成潜伏期間および臨界核半径を同時に考慮した静的再結晶 Phase-Field シミュレーション, 日本機械学会第 23 回計算力学講演会, 2010 年 9 月 23 日, 北見
8. Muramatsu, M., Aoyagi, Y. and Shizawa, K., Modeling of Static Recrystallization and Nucleus Growth Simulation Considering Nucleation Incubation Period and Critical Nucleus Radius, The 16th International Conference on Crystal Growth, 2010 年 8 月 10 日, Beijing
9. Muramatsu, M., Aoyagi, Y. and Shizawa, K., Multiscale Modeling and Simulation on Dynamic Recrystallization Based on Phase-Field Method and Dislocation-Crystal Plasticity Theory, The 16th International Symposium on Plasticity and Its Current Applications, 2010 年 1 月 4 日, Frigate Bay

[その他]

ホームページ

<http://www.shizawa.mech.keio.ac.jp>

#### 6. 研究組織

##### (1) 研究代表者

青柳 吉輝 (AOYAGI YOSHITERU)

独立行政法人日本原子力研究開発機構  
原子力基礎工学研究部門・研究員  
研究者番号：70433737

##### (2) 研究分担者

志澤 一之 (SHIZAWA KAZUYUKI)

慶應義塾大学・理工学部・教授

研究者番号：80211952

##### (3) 連携研究者

なし