

機関番号 : 12608

研究種目 : 研究活動スタート支援

研究期間 : 2009 ~ 2010

課題番号 : 21860029

研究課題名 (和文) 結晶塑性 Phase-Field 法による組織形成予測および弾塑性変形解析法の開発

研究課題名 (英文) Development of Crystal Plasticity Phase-Field Method for Prediction of Microstructure Evolution and Elastoplastic Deformation.

研究代表者

山中 晃徳 (YAMANAKA AKINORI)

東京工業大学・大学院理工学研究科・助教

研究者番号 : 50542198

研究成果の概要 (和文) :

鉄鋼材料における相変態など弾塑性変形を伴う材料組織形成を再現可能な結晶塑性 Phase-Field モデルの開発を行った。本モデルでは、結晶塑性解析に FFT を用い、組織形成と弾塑性変形の同時シミュレーションを可能とした。また、構築したモデルを用いて、マルテンサイト相形成過程のシミュレーションを行った。さらに、GPU によるシミュレーションの超高速計算を達成し、定量的な大規模計算の実現可能性を示した。

研究成果の概要 (英文) :

To simulate microstructure evolution with elastoplastic deformation, we developed a new crystal plasticity Phase-Field model. In this model, the microstructure evolution with the elastoplastic deformation could be simulated by FFT. Also, the martensitic transformation was simulated with the developed model. We demonstrated that acceleration of Phase-Field simulation can realize by using GPU.

交付決定額

(金額単位 : 円)

	直接経費	間接経費	合計
2009 年度	1,060,000	318,000	1,378,000
2010 年度	870,000	261,000	1,131,000
年度			
年度			
年度			
総計	1,930,000	579,000	2,509,000

研究分野 : 計算力学, 計算材料組織学

科研費の分科・細目 : 機械材料・材料力学

キーワード : Phase-Field 法, 結晶塑性, 微視組織, 鉄鋼材料

1. 研究開始当初の背景

金属材料の力学特性は、材料内部の微視組織の分布や組織そのものの形態に強く依存している。そのため、再結晶や相変態などが生じる材料の製造過程における組織形成過程を予測可能な数値シミュレーション法の開発が求められている。これに対し近年、Phase-Field 法を用いた組織形成シミュレーションは、組織の全自由エネルギーに基づき組織形成過程を表現できる方法であり、Phase-Field 法が有する頑強な理論体系の故に、種々の材料における組織形成過程の数値シミュレーションに適用され、大きく注目されている。しかしながら、たとえば鉄鋼材料の強化相として用いられるマルテンサイト相やベイナイト相の形成過程のように組織発展と材料の弾塑性変形が同時に生じる現象を統一的に記述できる Phase-Field モデルは、ほとんど見当たらない。したがって、弾塑性変形と組織発展を同時に再現し、予測しうる Phase-field モデルは非常に有益な解析手法となるものと期待される。

2. 研究の目的

本研究では、再結晶や相変態による組織形成過程と材料の弾塑性変形を統一的に解析可能とし、さらに塑性変形による結晶方位変化や転位密度変化をも評価可能な結晶塑性理論 Phase-Field モデルを構築することを目的とした。

3. 研究の方法

(1) 弾塑性変形に伴う材料の流動を Phase-Field 法を用いて表現するための移流計算法や高速フーリエ変換を用いたスペクトル法による結晶塑性解析法を開発する。

(2) (1)で開発するスペクトル法による結晶塑性解析法を、これまで開発してきた Phase-Field モデルに導入し、結晶塑性 Phase-Field モデルを構築する。

(3) (2)で構築した結晶塑性 Phase-Field モデルを用いて、実際の鉄鋼材料における材料組織形成過程のシミュレーションを行い、適用可能性を検討する。

(4) 結晶塑性解析と組織計算の効率化を図るため、Graphic Processing Unit (GPU) による Phase-Field シミュレーションの超高速計算法の検討を行う。

4. 研究成果

4.1 結晶塑性 Phase-Field モデルの構築

本研究で構築した結晶塑性 Phase-Field モ

デルを以下に示す。

本モデルにおける、系の全自由エネルギー G_{total} は、従来と同様に化学的自由エネルギー G_{chem} 、勾配エネルギー G_{grad} および弾性ひずみエネルギー G_{elast} の和として、次式のように定義する。

$$G_{total} = G_{chem} + G_{grad} + G_{elast}$$

ここで、化学的自由エネルギー G_{chem} は、秩序変数 ϕ_i の多項展開式で表現する。

$$G_{chem} = \int_V \left\{ \frac{A}{4} \sum_{i=1}^N \phi_i^2 - \frac{B}{2} \sum_{i=1}^N \phi_i^3 + \frac{C}{12} \sum_{i=1}^N (\phi_i^2)^2 \right\} dV$$

ここで、秩序変数 ϕ_i ($i = 1, 2, \dots, M$) は、 N 個ある結晶粒のうち、ある i 番目の結晶粒内で $\phi_i = 1$ 、それ以外の結晶粒で $\phi_i = 0$ となり、界面領域で滑らかに変化する変数である。また、 A, B, C は展開係数である。勾配エネルギーは、勾配エネルギー係数 κ を用いて、次式で表す。

$$G_{grad} = \int_V \frac{\kappa}{2} \sum_{i=1}^N |\nabla \phi_i|^2 dV$$

弾性ひずみエネルギーは、Phase-Field Microelasticity 理論に基づき評価する。

$$G_{elast} = \frac{1}{2} \int_V C_{ijkl} (\epsilon_{kl}^c - \epsilon_{kl}^0) (\epsilon_{ij}^c - \epsilon_{ij}^0) dV$$

ここで、 C_{ijkl} は弾性係数マトリクス、 ϵ_{ij}^c は全ひずみ、 ϵ_{ij}^0 は固有ひずみである。全ひずみは、均一ひずみ $\bar{\epsilon}_{ij}^c$ と変動ひずみ $\delta\epsilon_{ij}^c$ の和として定義され、無限遠方では系は自由表面を有していることを仮定すると、それぞれ次式で表される。

$$\bar{\epsilon}_{ij}^c = \frac{1}{V} \int_V \epsilon_{ij}^0 dV$$

$$\delta\epsilon_{ij}^c = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{k/2}^1 (n_j \Omega_m(\vec{n}) + n_i \Omega_m(\vec{n})) n_n \hat{\sigma}_{mn}(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) d\vec{k}$$

本モデルでは、上式の変動ひずみ $\delta\epsilon_{ij}^c$ を求める際に高速フーリエ変換を用いる。

さらに、弾性ひずみエネルギーより、Cauchy 応力は次式であらわされる。

$$\sigma_{ij} = \frac{\delta G_{elast}}{\delta \epsilon_{ij}^{el}}$$

本研究では、相変態による組織形成とそれに伴う弾塑性変形を解析するために、固有ひずみ ϵ_{ij}^0 は変態ひずみ ϵ_{ij}^{trans} と塑性ひずみ ϵ_{ij}^p の和として次式で定義する。

$$\epsilon_{ij}^0 = \epsilon_{ij}^{trans} + \epsilon_{ij}^p$$

変態ひずみは、 N 個あるバリエントのうち、ある m 番目バリエントの析出物が形成する際

の変態ひずみと秩序変数との線形関数として、例えば次式のように定義する。

$$\varepsilon_{ij}^{trans} = \sum_{m=1}^N \varepsilon_{ij}^{00}(m) \phi_m$$

これにより、任意形状の析出物を含む系の弾性ひずみエネルギーが評価できる。

一方、塑性ひずみは結晶塑性理論に基づき、次式の塑性ひずみ速度を時間積分して求める。

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = P_{ij}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}$$

ここで、 $P_{ij}^{(\alpha)}$ はSchmidテンソル、 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ はせん断ひずみ速度であり、ひずみ速度依存性型の次式を用いる。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{\frac{1}{m}-1}$$

また、加工硬化を表現するための、臨界分解せん断応力の時間発展式には、次式を用いる。

$$g^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^n h_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}|$$

ここで、 $h_{\alpha\beta}$ は硬化係数であり、塑性せん断ひずみ $\gamma = \sum_{\alpha=1}^n |\dot{\gamma}^{(\alpha)}|$ に依存した関数を用いる。

以上より、系の全自由エネルギー G_{total} を用いて、新相の形成過程を記述する時間発展方程式は、次式であらわされる。なお、 M_ϕ は秩序変数の易動度である。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -M_\phi \frac{\delta G_{total}}{\delta \phi_i}$$

上式の時間発展方程式および塑性ひずみの発展方程式を差分法等で離散化し、数値解析することで組織発展に伴う塑性変形や塑性変形による結晶方位変化を評価できる。また、平衡方程式を解き局所変位およびひずみを求める過程でフーリエ変換を用いており、収束計算を必要としないため高速な数値シミュレーションが可能である。

4.2 結晶塑性Phase-Fieldモデルを用いた析出物形成シミュレーション

4.1で説明した結晶塑性Phase-Fieldモデルを用いて、単純な球状析出物の成長過程の3次元シミュレーションを行い、析出物周りの応力変化や塑性変形挙動を評価した。

図1に、シミュレーションモデルを示す。解析領域の大きさは $48 \times 48 \times 48 \mu\text{m}^3$ である。初期状態においては解析領域内に2つの析出物をランダムな位置に形成させる。母相および析出物ともにすべり系の数は12とし、結晶方位はすべて同一とする。相変態においては等方的な体積膨張成分の変態ひずみが生じるものとする。数値解析における境界条件は、全方向周期境界条件を適用する。

図2に、シミュレーションで得られた析出

物の成長過程を示す。ここで、析出物は $\phi_i > 0.9$ ($i = 1, 2$)を満たす領域に色付けして示している。この結果より、時間とともに析出物は等方的に成長し、析出物同士が衝突すると結晶粒界を形成していることがわかる。

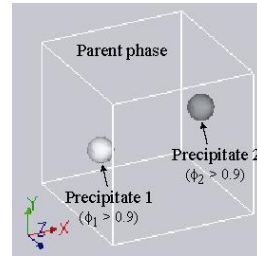


図1 シミュレーションモデル

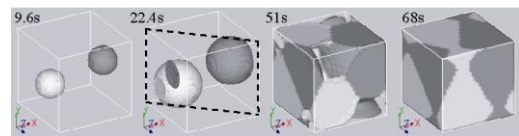


図2 球状析出物の形成過程

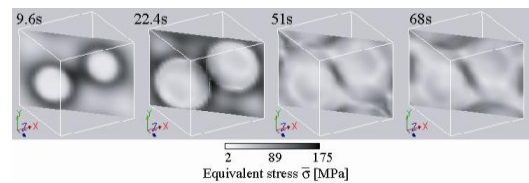


図3 相当応力分布

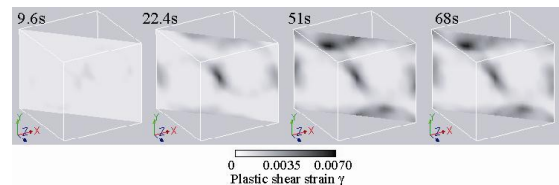


図4 相当塑性ひずみ分布

図3に、図2の破線で示す断面での相当応力分布の時間変化を示す。母相から析出物が形成する際に、等方的な体積膨張が生じるため、界面近傍の母相では引張り応力が生じ、高い応力の領域が形成される。さらに、その応力を増加させながら、母相/析出物界面とともに移動していることがわかる。特に、析出物に挟まれた母相で高い応力を示しており、図4に示すように高い応力を示す界面近傍や析出物に挟まれた母相において塑性変形が生じる。さらに、析出物が互いに衝突して結晶粒界を形成すると、粒界において塑性ひずみを残して、応力は減少している。したがって、相変態が完了し解析領域内が析出物で満たされた後も、粒界近傍などの析出物内部には残留応力が生じていることがわかる。

4.3 鉄鋼材料におけるマルテンサイト変態シミュレーションへの適用

4.1 で示した結晶塑性 Phase-Field モデルを用いて、鉄鋼材料におけるマルテンサイト変態の3次元シミュレーションを行った。

本研究では、Fe-Ni 合金におけるマルテンサイト変態をモデル化するために、固有ひずみを次式のように定義する。

$$\varepsilon_{ij}^0 = \sum_{m=1}^3 R_{ik} R_{jl} \varepsilon_{kl}^{00}(m) \phi_m + \varepsilon_{ij}^p$$

ここで、 $\varepsilon_{kl}^{00}(m)$ は形成するバリエント(兄弟晶)のマルテンサイト相のうち、 m 番目のバリエントが生じる際の変態ひずみである。本研究ではマルテンサイト相のバリエントとして西山-Wasserman (NW) バリエントを用いる。このとき、変態ひずみは次式のように表される。

$$\varepsilon_{ij}^{00}(m) = \frac{1}{2} g (n_i^{(m)} l_j^{(m)} + n_j^{(m)} l_i^{(m)})$$

ここで、 g はマルテンサイト変態で生じるせん断変形の大きさ、 n_j 、 l_j はそれぞれ晶癖面の法線ベクトル、せん断変形方向ベクトルである。また、 ϕ_m はそのバリエントの存在確率である。本シミュレーションでは、多結晶体におけるマルテンサイト相の形成過程をシミュレートするため、回転マトリクス R_{ij} を用いて母相の結晶方位に合わせて変態ひずみを座標変換している。

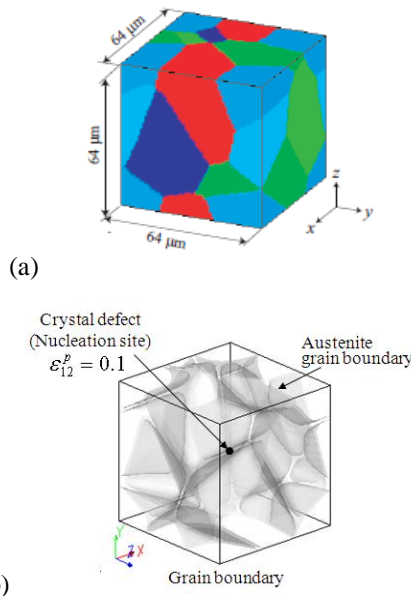


図5 マルテンサイト変態のシミュレーションモデル

図5に、オーステナイト母相の多結晶構造のモデルを示す。解析領域内には10個の結晶粒が存在する。温度は、255K で一定とし、

等温変態におけるマルテンサイト組織の形成過程を再現する。さらに、マルテンサイト相の核形成サイトとなる結晶欠陥を表現するために、図5 (b)に示すように解析領域中央付近の結晶粒界上に微小な塑性ひずみを与える。

図6に、各NWバリエントを持つマルテンサイト相の形成過程を示す。母相中に配置した結晶欠陥から形成したマルテンサイト相は、時間とともに成長している。また、最初にマルテンサイト相が形成した結晶粒以外においても、変態によって生じた内部応力場に誘起され次々とマルテンサイト相が形成している。さらに、マルテンサイト相は自身が形成することで生じる弾性ひずみエネルギーが最小となるように、プレート状もしくは板状の形態を呈し、層状の組織形態となっていることがわかる。

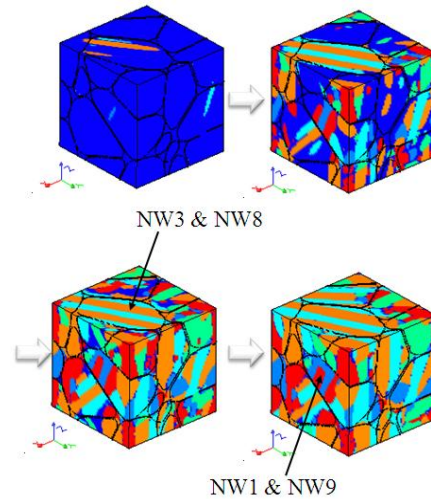


図6 マルテンサイト相の形成過程

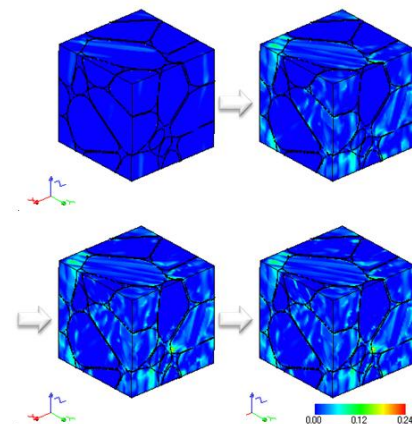


図7 マルテンサイト相形成による相当塑性ひずみ分布の変化

図7に、マルテンサイト相組織の発展とそれに伴う相当塑性ひずみ分布の変化を示す。マルテンサイト相の形成においては、大きな

膨張を伴う変態ひずみが発生するため、それにより生じる応力を緩和するため、マルテンサイト相の近傍、特にバリエーション間の界面付近で塑性ひずみが生じていることがわかる。

以上のシミュレーション結果より、本研究で構築した結晶塑性Phase-Fieldモデルを用いることにより、鉄鋼材料において生じる塑性変形を伴うマルテンサイト変態を再現でき、組織形成過程と変態ひずみの発生による塑性変形挙動も解析できることが示される。

本モデルをさらに高精度化していくことで、ラスマルテンサイト組織といった鉄鋼材料の高強度化に重要な組織の形成予測が可能になることが期待される。

4.4 GPU による Phase-Field シミュレーションの高速化

4.3 で示したように、結晶塑性 Phase-Field モデルを用いて鉄鋼材料における塑性変形を伴うマルテンサイト変態といった組織形成過程をシミュレート可能であるが、実際には結晶塑性解析と組織発展計算を同時に計算するため、3次元解析となると計算コストが大きい。その反面、より定量的な計算結果を得るためには、境界条件の影響を低減するためにも、より多くの結晶粒内での変態挙動をシミュレートする必要があり、計算領域の拡大が重要となる。そこで、本研究では結晶塑性 Phase-Field モデルを用いたシミュレーションの高速化・効率化を図るため、次世代の計算機ハードウェアとして注目されている GPU を用いた Phase-Field シミュレーションの超高速計算法を検討した。

本研究では、はじめに NVIDIA 社の GPU を用いて Phase-Field シミュレーションを高速化が可能であるかを確認するため、すでに開発済みの合金凝固組織(デンドライト)形成シミュレーションのプログラムコードを基に、GPU 計算用に CUDA プログラム開発した。

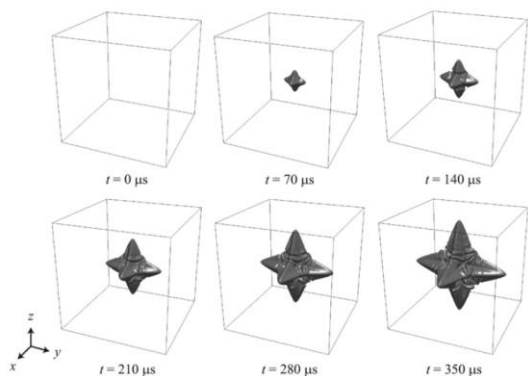


図 8 GPU で計算した合金凝固組織の形成過程

図 8 は、NVIDIA 社の GPU TESLA C1060 を用いて計算を行って得られた Ni-Cu 合金のデンドライト形成過程である。このシミュレーションでは、576×576×576 格子の解析領域中央に核を置いた。この結果より、GPU を用いた計算でも、デンドライトの形成過程をうまく再現できていることが確認できる。

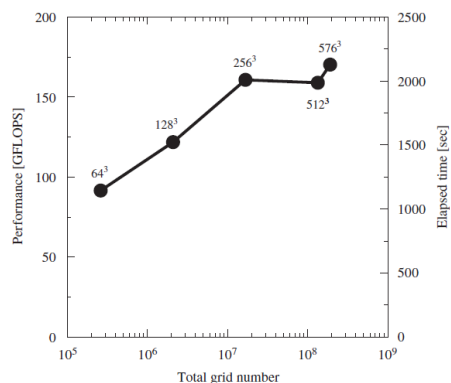


図 9 GPU による計算性能

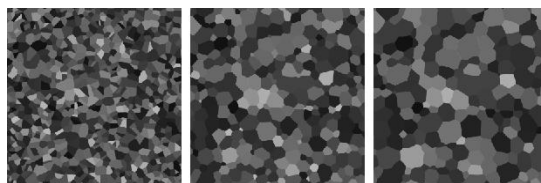


図 10 GPU で計算した多結晶粒成長過程

また、同じシミュレーションを CPU (Intel core i7 950) で行った場合の計算速度が 0.24GFLOPS (1FLOPS は 1 秒間で 1 回の四則演算回数を表す) であるのに対し、GPU では 155.5GFLOPS となり、約 600 倍の高速化が可能となった。図 9 に、GPU を用いた同シミュレーションにおいて、解析領域の大きさを変化させたときの計算性能の変化を示す。この結果より、解析領域が大きくなるほど FLOPS 値は向上しており、GPU を用いることで大規模な計算領域で Phase-Field シミュレーションを行っても、従来の CPU による計算に比べて少なくとも数 100 倍の高速化が可能であることが示された。

さらに、多結晶体における組織形成過程を再現可能な Multi-Phase-Field 法を用いたシミュレーションに対しても、GPU による高速化が可能であるかを確認した。図 10 に、GPU を用いて Multi-Phase-Field 法による多結晶粒成長シミュレーションを行った結果を示す。粒成長挙動が再現できている事が確認でき、図 11 に示すように Multi-Phase-Field 法を用いた組織形成シミュレーションに対しても CPU を用いたシミュレーションに比べて、約 5 倍の高速化を実現した。

以上の結果より、GPU を用いることで Phase-Field シミュレーションを飛躍的に高速化することができた。本研究では、東京工業大学のスーパーコンピュータ TSUBAME2.0 において Phase-Field シミュレーションの超並列 GPU 計算を可能としており、こうした GPU 計算技術を用いることで、本研究で構築した結晶塑性 Phase-Field モデルについても大規模なシミュレーションの実行が可能であると言える。

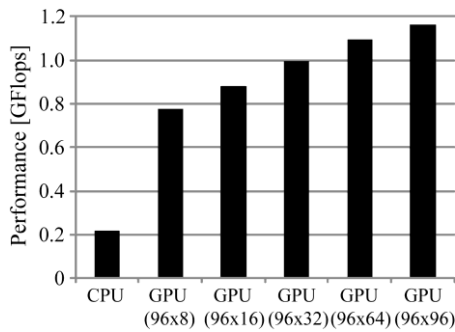


図 11 GPU と CPU での計算性能の比較

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 5 件)

- (1) A. Yamanaka, T. Aoki, S. Ogawa and T. Takaki, GPU-accelerated Phase-Field Simulation of Dendritic Solidification in a Binary Alloy, *Journal of Crystal Growth*, (2011), **318**, 40-45. 査読あり
- (2) 山中晃徳, 小川 慧, 青木 尊之, 高木知弘, GPU によるマルチ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*, (2010), **2010**, 20100009. 査読あり
- (3) 小川 慧, 青木 尊之, 山中晃徳, マルチ GPU によるフェーズフィールド相転移計算のスケラビリティ ~ 40 GPU で 5 TFLOPS の実効性能 ~, *情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム (ACS)*, (2010), **3-2**, 67-75. 査読あり
- (4) A. Yamanaka, T. Takaki and Y. Tomita, Elastoplastic Phase-Field Simulation of Martensitic Transformation with Plastic Deformation in Polycrystal, *International Journal of Mechanical Sciences*, (2010), **52**, 245-250. 査読あり
- (5) 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, 結晶塑性 Phase-Field モデルの構築と塑性変形を伴う微視組織形成過程のシミュレーション, *日本機械学会論文集 A 編*, (2009), **75**, 1794-1803. 査読あり

[学会発表] (計 8 件)

- (1) 山中晃徳, 青木尊之, 高木知弘, GPU によるフェライト変態の Multi-Phase-Field シミュレーションの高速化, 第 54 回 日本学術会議材料工学連合講演会, 2010 年 10 月 25-27

日, 京都.

- (2) A. Yamanaka, T. Aoki, S. Ogawa and T. Takaki, GPU accelerated Multi-Phase-Simulation of Microstructure Evolution during Phase Transformation in Alloys, The 16th International Conference on Crystal Growth, August 8-13, (2010), Beijing, China.

- (3) A. Yamanaka, S. Ogawa and T. Aoki, High Performance Computing of Phase-Field Simulation for Phase Transformation in Steel by GPU, The 2nd International Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, February 3-5, (2010), Japan.

- (4) 小川慧, 青木尊之, 山中晃徳, マルチ GPU によるフェーズフィールド相転移計算のスケラビリティ ~ 40 GPU で 5 TFLOPS の実効性能 ~, 2010 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, 2010 年 1 月 14-15 日, 東京.

- (5) A. Yamanaka, Tomohiro Takaki, Yoshihiro Tomita and Masahiko Yoshino, Crystal Plasticity Phase-Field Simulation of Deformation Behavior and Microstructure Evolution in Polycrystalline Material, Xth International Conference on Computational Plasticity, September 2-4, (2009), Barcelona, Spain.

- (6) A. Yamanaka, T. Takaki and Y. Tomita, Crystal Plasticity Phase-Field Simulation of Microstructure Evolution with Elastoplastic Deformation, The 2nd Symposium on Phase-Field Modelling in Materials Science, August 30- September 2, (2009), Germany.

[その他]

- (1) 日本材料学会平成 22 年度塑性工学部門委員会優秀講演発表賞, 山中晃徳, GPU によるフェライト変態の Multi-Phase-Field シミュレーションの高速化(学会発表(1)), 2011 年 11 月.
- (2) 日本機械学会賞(論文), 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, 結晶塑性 Phase-Field モデルの構築と塑性変形を伴う微視組織形成過程のシミュレーション(雑誌論文(5)), 2011 年 4 月.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山中 晃徳 (YAMANAKA AKINORI)
東京工業大学・理工学研究科・助教
研究者番号: 50543198