

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 25 日現在

機関番号：14303

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2013～2014

課題番号：25630011

研究課題名(和文) ミクロ組織発展とマクロ力学特性の動的再結晶マルチスケールモデルの構築

研究課題名(英文) Development of Dynamic Recrystallization Multiscale Model for Microstructure
Development and Macroscopic Mechanical Behavior

研究代表者

高木 知弘 (Takaki, Tomohiro)

京都工芸繊維大学・工学科学研究科・准教授

研究者番号：50294260

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,300,000円

研究成果の概要(和文)：動的再結晶材料の熱間加工におけるミクロ組織発展とマクロ力学特性を同時に表現可能な新しい熱間加工マルチスケールモデルの構築を目的とした。ここで、マルチフェーズフィールドモデルを用いた動的再結晶(MPF-DRX)モデルと、熱間加工の大変形弾塑性有限要素法を連成させた、熱間加工マルチスケール(MPFFE-DRX)モデルを構築した。また、構築したモデルを用いた円柱の不均一圧縮シミュレーションを行うことで、モデルの有用性を示すとともに、適用範囲を確認した。加えて、更なる高精度なモデルの構築を目指し、結晶塑性有限要素法とマルチフェーズフィールド法を連成させる動的再結晶モデルの構築に着手した。

研究成果の概要(英文)：A new hot-working multiscale model, which can simulate the microstructure evolutions and the macroscopic mechanical behaviors simultaneously, has been developed. This model is called the multi-phase-field and finite element dynamic recrystallization (MPFFE-DRX) model, where the microstructure evolutions are simulated by the multi-phase-field method and the macroscopic mechanical behaviors are computed by the conventional finite element method for the elastic-plastic large deformation problem. By performing the nonuniform compression simulations of a cylinder, an availability and validity of the developed MPFFE-DRX model have been investigated. In addition, we started the study to develop more accurate dynamic recrystallization model by coupling the crystal plasticity finite element method and multi-phase-field model.

研究分野：計算力学，材料力学，材料組織学

キーワード：フェーズフィールド法 マルチスケールモデル 動的再結晶 熱間加工 有限要素法

1. 研究開始当初の背景

金属材料を再結晶温度以上の高温で加工(熱間加工)すると、塑性変形の転位蓄積による硬化と、再結晶粒の核生成と成長による軟化が同時に生じる。この現象は動的再結晶(dynamic recrystallization : DRX)と呼ばれている。動的再結晶は結晶粒の微細化が可能であり、材料強化法として注目されているが、組織変化と塑性変形が同時に生じる極めて複雑な現象であると同時に、ミクロ場とマクロ場が強く影響しあうマルチスケール問題であり、数値的に表現することは大変困難である。通常の熱間加工シミュレーションでは、再結晶分率や平均粒径を内部変数とした有限要素計算が行われているが、複雑な加工履歴と温度履歴に対応する構成式の構築は困難であり、またミクロ組織を直接得ることはできない。このため、ミクロ組織の変化を直接取り扱い、マクロな加工特性を評価可能なマルチスケール数値シミュレーション手法の構築が望まれている。

2. 研究の目的

上記のような背景を受け、本研究では動的再結晶材料の熱間加工における、ミクロ組織発展とマクロ力学特性を同時に表現可能な新しい熱間加工マルチスケールモデルの構築を目的とする。

3. 研究の方法

これまでの研究[1-3]において、マルチフェーズフィールド(multi-phase-field : MPF)法を用いたミクロな再結晶組織変化に基づくユニットセルの応力 - ひずみ関係の導出を可能とするマルチフェーズフィールド動的再結晶(multi-phase-field dynamic recrystallization : MPF-DRX)モデルを構築してきた。このモデルは、図1に示すように、ミクロ組織発展を直接表現し、この結果に基づいたユニットセルの応力 - ひずみ関係を導出可能なことから、これを熱間加工の有限要素計算の単軸構成式に直接用いることができるだろうという着想に至った。

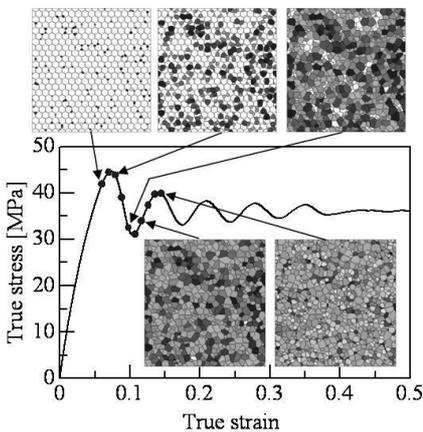


図1 MPF-DRXモデルによるミクロ組織発展と系の応力 - ひずみ関係

そこで、動的再結晶を伴う金属材料の熱間加工のマクロな力学的特性を一般的な有限要素法を用いて評価し、有限要素個々に対してミクロ組織発展をMPF-DRXモデルを用いて評価する、ミクロ組織発展とマクロ熱間加工挙動を同時に評価可能なマルチスケールモデルを構築する。

4. 研究成果

(1) マルチフェーズフィールドモデルを用いた動的再結晶モデル(MPF-DRXモデル)と、熱間加工の大変形弾塑性有限要素法を連させた、熱間加工マルチスケール(multi-phase-field and finite element dynamic recrystallization : MPFFE-DRX)モデルの構築を完了させた[4]。図2は円柱の不均一圧縮シミュレーションのマクロ場とミクロ場の計算条件と境界条件を示す。円柱を軸対称体とし、1/4領域を三角形要素を用いて要素分割を行い、図のような境界条件を設定した。また、全ての三角形要素に対してミクロ組織を解く差分領域を用意している。図3は、マクロ場の変形とマクロ場 10, 20, 30, 40, 50%圧縮時の図2中の要素A・B・Cのミクロ組織発展を示している。このように、マクロな変形とミクロな組織発展を同時に表現できていることがわかる。また、このようなシミュレーションを、温度とひずみ速度を系統的に変化させて行い、モデルの適用範囲を明らかにした[5]。

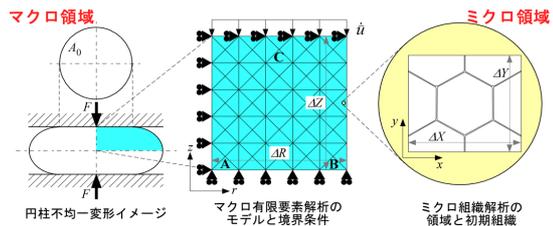


図2 MPFFE-DRX熱間加工マルチスケールシミュレーションのマクロ・ミクロ計算条件

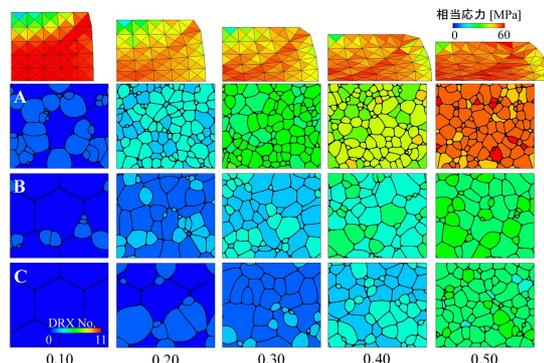


図3 マクロ変形と図2中に示す要素A, B, Cのミクロ組織発展

(2) マクロ場の熱伝導方程式を解くことで、構築したMPFFE-DRXモデルを非等温度場へ拡張した。ここで、境界からの熱の出入りと

加工発熱を考慮した。図4は、図2の計算条件において、初期温度を800 K、マクロ場の上下端を700 Kに固定した際のマクロ場の応力とひずみの関係を示す。なお、マクロ場のサイズ $\Delta R \times \Delta Z$ を図中のように変化させている。この結果より、円柱サイズが小さい場合は冷却速度が速く、境界温度の700 Kで一定の場合に近い結果を示す。一方、円柱が大きい場合は、冷め難いことと、内部発熱が大きいことから、材料を800 K一定で圧縮する際の曲線に近くなっていることがわかる。このように、非等温度場への適用も可能であり、実際の熱間加工で利用できることを示した。

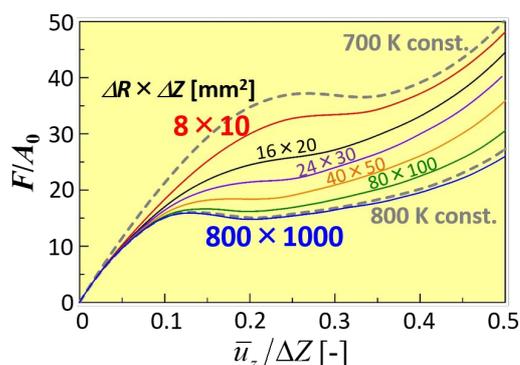


図4 非等温度解析におけるマクロ場の円柱サイズを変化させたさいのマクロ応力-ひずみ曲線の変化

(3) MPFFE-DRX シミュレーション後の冷却過程におけるミクロ組織変化を表現可能なモデルを構築した。この場合、転位密度の回復と静的再結晶を表現した。このモデルの構築により、熱間加工から冷却までの連続したマクロな力学的特性とミクロ組織変化の表現を可能とした。

(4) 構築してきた MPFFE-DRX モデルより更に高精度な DRX モデルの構築を目指し、材料組織の変形を結晶塑性有限要素法を用い、組織発展をマルチフェーズフィールド法で表現するモデルの構築に着手した。このモデルでは、DRX の主な核生成メカニズムとされている粒界バルジングによる核生成の表現を目的としている。MPFFE-DRX モデルに比べて取り扱うことの可能な領域サイズは極めて小さいが、組織内の力学場と組織発展を同時に解くモデルは、材料科学において重要であり、今後の更なる発展を目指す。

以上が研究成果であるが、(2)(3)(4)に関してはまだ論文執筆ができるところまで研究が進んでいないので、継続的に研究を進める。

<引用文献>

T. Takaki, T. Hirouchi, Y. Hisakuni, A. Yamanaka, Y. Tomita, Multi-phase-field model to simulate microstructure evolutions during dynamic recrystallization, *Materials*

Transactions, Vol. 49, 2008, pp. 2559-2565.
T. Takaki, Y. Hisakuni, T. Hirouchi, A. Yamanaka, Y. Tomita, Multi-phase-field simulations for dynamic recrystallization, *Computational Materials Science*, Vol. 45, 2009, pp. 881-888.

T. Takaki, A. Yamanaka, Y. Tomita, Multi-phase-field simulations of dynamic recrystallization during transient deformation, *ISIJ International*, Vol. 51, 2011, pp. 1717-1723.

T. Takaki, C. Yoshimoto, A. Yamanaka, Y. Tomita, Multiscale modeling of hot-working with dynamic recrystallization by coupling microstructure evolution and macroscopic mechanical behavior, *International Journal of Plasticity*, Vol. 52, 2014, pp.105-116.

C. Yoshimoto, T. Takaki, Multiscale hot-working simulations using multi-phase-field and finite element dynamic recrystallization model, *ISIJ International*, Vol. 54, 2014, pp. 452-459.

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5件)

T. Takaki, A. Yamanaka, Y. Tomita, Phase-Field Modeling for Dynamic Recrystallization, *Advanced Structured Materials*, 査読有, 2015/06, 441-459.

<http://www.springer.com/de/book/9783319194394>

A. Yamanaka, T. Takaki, Multi-Phase-Field Analysis of Stress-Strain Curve and Ferrite Grain Formation during Dynamic Strain-Induced Ferrite Transformation, *Key Engineering Materials*, 査読有, Volume 626, 2015, pp. 81-84.

doi:10.4028/www.scientific.net/KEM.626.81

A. Yamanaka, T. Takaki, Multi-Phase-Field Simulation of Flow Stress and Microstructural Evolution during Deformation-Induced Ferrite Transformation in a Fe-C Alloy, *ISIJ International*, 査読有, Vol. 54, 2014, pp. 2917-2925.

doi.org/10.2355/isijinternational.54.2917

T. Takaki, C. Yoshimoto, A. Yamanaka, Y. Tomita, Multiscale modeling of hot-working with dynamic recrystallization by coupling microstructure evolution and macroscopic mechanical behavior, *International Journal of Plasticity*, 査読有, Vol. 52, 2014, pp.105-116.

doi:10.1016/j.ijplas.2013.09.001

C. Yoshimoto, T. Takaki, Multiscale

hot-working simulations using multi-phase-field and finite element dynamic recrystallization model, ISIJ International, 査読有, Vol. 54, 2014, pp. 452-459.
doi.org/10.2355/isijinternational.54.452

〔学会発表〕(計 17 件)

山口鷹人, 高木知弘, 粒界バルジングによる核生成予測のための multi-phase-field 結晶塑性モデリング, 日本機械学会 関西支部第 90 期定時総会講演会, 2015 年 3 月 16-17 日, 京大桂キャンパス (京都市).

吉本千尋, 高木知弘, 熱間加工マルチスケールシミュレータの開発, 第 58 回材工研講演会, 2014 年 10 月 27-28 日, 京都テルサ (京都市).

山口鷹人, 高木知弘, 粒界バルジングによる動的再結晶核予測のための multi-phase-field 結晶塑性モデル, 第 58 回材工研講演会, 2014 年 10 月 27-28 日, 京都テルサ (京都市).

T. Takaki, C. Yoshimoto, Hot-working Multiscale Simulations Using Multi-phase-field Finite Element Dynamic Recrystallization Model, 7th International Conference on Multiscale Materials Modelling (MMM2014), October 6-10, 2014, Berkeley, (USA).

T. Yamaguchi, T. Takaki, Development of Multi-phase-field Crystal Plasticity Model for Grain Boundary Bulging during Dynamic Recrystallization, 7th International Conference on Multiscale Materials Modelling (MMM2014), October 6-10, 2014, Berkeley, (USA).

T. Takaki, C. Yoshimoto Multiscale Hot-working Simulations for Macro-deformation and Micro-structure Using MPFFE-DRX Model, The Third International Symposium on Phase-field Method 2014 (PFM2014), August 26 - 29, 2014, State College, PA, (USA).

山口鷹人, 高木知弘, Multi-phase-field 結晶塑性モデルによる粒界バルジングのシミュレーション, 第 19 回計算工学講演会, 2014 年 6 月 11-13 日, 広島国際会議場 (広島市).

高木知弘, Multi-phase-field 法と結晶塑性有限要素法による動的再結晶時の粒界張出モデルの構築, 日本材料学会第 63 期通学術講演会, 2014 年 5 月 17-18 日, 福岡大学 (福岡市).

T. Takaki, Multi-scale Hot-working Simulations Using Phase-field and Finite Element Methods, KSME-JSME Joint Symposium on Computational Mechanics & CAE 2014, 1st, May, 2014, Seogwipo KAL

Hotel (Korea).

T. Takaki, Dynamic Recrystallization Modeling Using Multi-Phase-Field Method and Crystal-Plasticity Finite Element Method [Keynote], 5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics & 4th International Symposium on Computational Mechanics (APCOM & ISCM), 11-14th December, 2013, Singapore (Singapore).

C. Yoshimoto, T. Takaki, Multiscale hot-working simulations by MPFFE-DRX model, 5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics & 4th International Symposium on Computational Mechanics (APCOM & ISCM), 11-14th December, 2013, Singapore (Singapore).

高木知弘, 吉本千尋, PSN による動的再結晶を伴う熱間加工マルチスケールモデルの検討, 第 57 回日本学術会議材料工学連合講演会講演論文集, 2013 年 11 月 25 日, 京都テルサ (京都市).

吉本千尋, 高木知弘, ミクロ場とマクロ場の連成計算による熱間加工中の金属材料の変形特性評価, 日本機械学会第 26 回計算力学講演会, 2013 年 11 月 2 日, 佐賀大学 (佐賀市).

吉本千尋, 高木知弘, ミクロ組織発展とマクロ力学特性の熱間加工マルチスケール解析, 日本鉄鋼協会 第 166 回秋季講演大会, 2013 年 9 月 17-19 日, 金沢大学角間キャンパス (金沢市).

高木知弘, Phase-field 法による LPSO 型マグネシウム合金の動的再結晶シミュレーション, 日本機械学会 2013 年度年次大会「WS: シンク口型 LPSO 構造の力学特性と高強度 Mg 合金の変形機構(その 2)」, 2013 年 9 月 9 日, 岡山大学 (岡山市).

吉本千尋, 高木知弘, 熱間加工マルチスケールモデルによる不均一変形シミュレーション, 計算工学講演会論文集, Vol.18, 2013 年 6 月 19-21 日, 東京大学生産技術研究所 (東京都).

C. Yoshimoto, T. Takaki, Hot-working Multiscale Simulations using Multi-phase-field Method and Finite Element Method, The 3rd International Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR2013), May 20-23, 2013, Stockholm (Sweden).

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕
○出願状況 (計 0 件)

〔その他〕
受賞

The Third International Symposium on Phase-field Method Poster Award, 2014年8月29日受賞. (T. Takaki, C. Yoshimoto, Multiscale Hot-working Simulations for Macro-deformation and Micro-structure Using MPFFE-DRX Model, The Third International Symposium on Phase-field Method 2014)

一般社団法人溶接学会 界面接合研究委員会
平成 25 年度 界面接合研究賞, 2014 年 6 月 5 日受賞

ホームページ :

<http://www.cis.kit.ac.jp/~takaki/>

6 . 研究組織

(1)研究代表者

高木 知弘 (TAKAKI, Tomohiro)

京都工芸繊維大学・工芸科学研究科・准教授

研究者番号 : 50294260

(2)研究分担者

無し

(3)連携研究者

無し