

特集記事・5

鉄鋼におけるマルチスケール・マルチフィジックス計算材料科学

マルチフェーズフィールド法を用いた鉄鋼材料の組織形成と変形挙動の数値シミュレーション

Numerical Simulation of Microstructure Evolution and Deformation Behavior in Steel Using Multi-Phase-Field Method

東京農工大学大学院
工学研究院先端機械システム部門
准教授

山中晃徳
Akinori Yamanaka

京都工芸繊維大学大学院
工芸科学研究科機械システム工学部門
准教授

高木知弘
Tomohiro Takaki

1 はじめに

自動車等の輸送機械の衝突安全性や燃費を向上させることを目的として、より強度と延性のバランスに優れた鉄鋼材料の研究開発が進んでいる¹⁾。現在、自動車車体に使用されている代表的な高強度鋼であるDP鋼は、軟質なフェライト相と硬質なマルテンサイト相の二相混合組織を有し、各相の結晶粒径、体積分率および分布形態を変化させることで、強度と延性を制御している²⁾。また、フェライト相、ベイナイト組織および残留オーステナイト相を内部組織とするTRIP鋼では、粒径や体積分率のみならず残留オーステナイト相の形態や溶質元素濃度を制御することが、高い延性を発現させるために非常に重要であるとされている³⁾。よって、鉄鋼材料の力学特性を向上させるためには、固相変態によるマイクロ組織形成を深く理解するとともに正確に予測することが重要である。しかしながら、鉄鋼材料のマイクロ組織は極めて多種多様であり、その形成過程は合金元素やその濃度、熱処理等に依存して複雑に変化する。したがって、計算材料科学すなわち数値シミュレーションを活用した、鉄鋼材料中のマイクロ組織形成やマイクロ組織に依存した力学特性を解析するための計算技術の確立を目指した研究が世界的に活発となっている⁴⁾。

そのなかでも、材料中のマイクロ組織形成を数値シミュレーションにより解析する方法として、1990年代前半には凝固分野を中心にフェーズフィールド (PF) 法⁵⁾が提案され、その後1990年代後半に多結晶組織形成を解析可能なマルチフェーズフィールド (MPF) 法が開発され、現在注目を集めているところである^{6,7)}。従来、材料中のマイクロ組織形成シミュレーション手法として、モンテカルロ (MC) 法やセルオートマトン (CA) 法が研究されてきたが、MPF法は実時間

を考慮したシミュレーションを行える点とマイクロ組織形成に及ぼす界面曲率の影響を考慮できる点で優れている。また、マイクロ組織の全自由エネルギーを基礎として様々なマイクロ組織形成やそれに伴う溶質元素の濃度場、応力場の変化を比較的容易に解析できる点も大きな魅力の一つと言える。したがって、MPF法は既に様々な材料中のマイクロ組織形成のシミュレーションに適用されており、鉄鋼材料の固相変態に限れば、フェライト変態⁸⁻¹⁰⁾、パーライト変態¹¹⁻¹²⁾、マルテンサイト変態¹³⁻¹⁵⁾のシミュレーションに適用されている。

さらに、MPF法で得られるマイクロ組織の形態情報に基づきマイクロ組織の代表体積要素 (RVE) を作成し、そのRVEに変形を与える有限要素解析やマイクロメカニクスシミュレーションを行うことで、そのマイクロ組織に依存した鉄鋼材料の力学特性評価が可能となる¹⁶⁻¹⁹⁾。したがって現在では、MPF法は鉄鋼材料のマイクロ組織形成とマイクロ組織に依存した力学特性を解析するための主要な計算ツールとして確固たる地位を固めつつある²⁰⁾。

本稿では、著者らが取り組んでいる研究のうち、MPF法を用いた鉄鋼材料の固相変態によるマイクロ組織形成と力学特性評価の数値シミュレーションに関する研究を紹介する。ただし、鉄鋼材料の固相変態や力学特性は、極めて多岐にわたる複雑な現象であるため、本稿のみでこの研究分野を網羅的に解説するには到底及ばない。本稿では、MPF法の概要とその応用の一例を紹介するに過ぎない。MPF法やその鉄鋼材料への適用については、これまでに優れたレビュー論文²¹⁻²³⁾や解説記事²⁴⁻²⁶⁾が出版されているので、これらも参考して頂ければ幸いである。

2 マルチフェーズフィールド法

MPF法は、鉄鋼材料に見られるような多相多結晶構造のミクロ組織の形成を解析可能な数値シミュレーション方法である。MPF法の定式化から数値シミュレーションまでの流れとして、著者らは、(1) 秩序変数(フェーズフィールド変数)の定義、(2) 全自由エネルギーの構築、(3) 秩序変数の時間発展方程式の導出、(4) パラメータと物性値との関係づけ、(5) 数値シミュレーションのための離散化の5ステップを基本としている²⁷⁾。以下では、この5ステップに沿ってSteinbachら²⁸⁾が提案したMPFモデルを紹介する。

2.1 秩序変数の定義

ミクロ組織の形成過程を記述するために必要な物理量を、座標 x と時間 t の関数である秩序変数として定義する。鉄鋼材料のミクロ組織は、複数の相や結晶粒で構成され、それらの変化には溶質原子の拡散を伴うことがほとんどである。ここでは、 N 個の結晶粒と n 種類の溶質元素で構成される材料を考え、この材料中で生じる界面の移動と溶質原子の拡散を表現するために、各結晶粒(各相)の存在確率を表すフェーズフィールド変数 $\phi_i(x,t)$ と溶質元素 i の濃度を表す変数 $C_i(x,t)$ を秩序変数として定義する。この他にも、結晶方位などの他の物理量を秩序変数として定義してもよいが、秩序変数が多いほど数値解析が複雑になる。したがって、記述したい現象を表現できる必要最低限の秩序変数を定義することが肝要である。

図1に、フェーズフィールド変数 $\phi_i(x,t)$ の定義を図示する。フェーズフィールド変数の下付き添え字 i は、多相多結晶構造を構成している N 個の結晶粒のうち、ある i 番目の結晶粒の存在確率であることを表している。本稿では、フェーズフィールド変数の下付き添え字 i を粒番号(Grain number)と呼ぶこととする。フェーズフィールド変数は、粒番号 i の結晶粒内

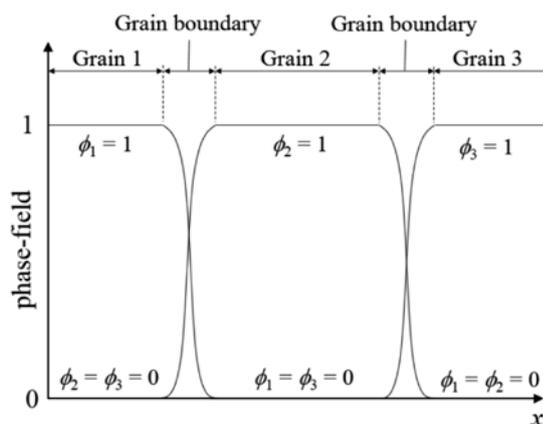


図1 MPF法におけるフェーズフィールド変数の定義

では $\phi_i(x,t) = 1$ 、他の結晶粒内では $\phi_i(x,t) = 0$ の値となり、粒番号 i の結晶粒と他の結晶粒との界面領域で滑らかに変化するものと定義される。したがって、フェーズフィールド変数は、任意の座標において、その総和が1となる制約条件を満たす必要がある。また、界面領域においてフェーズフィールド変数が滑らかに変化することを表現するため、MPF法における界面領域の長さは、現実の界面幅よりも大きな値をとる。このようにフェーズフィールド変数を定義することで、フェーズフィールド変数 $\phi_i(x,t)$ の時間発展を計算するだけで、容易に界面の移動を表現することが可能となる。

一方、溶質元素濃度 $C_i(x,t)$ は、各結晶粒(各相)のフェーズフィールド変数を用いて、次式のように定義されることが多い。

$$C_i(x,t) = \sum_{j=1}^N \phi_j(x,t) c_i^j(x,t) \dots\dots\dots (1)$$

ここで、 $C_i^j(x,t)$ は粒番号 j の結晶粒における溶質元素 i の濃度を表す変数である(本稿では、これを局所濃度と呼ぶ)。局所濃度は、粒番号 j の結晶粒の相や温度などに依存するが、平衡状態図を線形近似して求める方法^{9,29)}や計算状態図(CALPHAD法)に基づき計算する方法がある³⁰⁾。なお、次章以降は、表記を簡単にするために各秩序変数の (x,t) を省略する。

2.2 全自由エネルギーの構築

MPF法では、ミクロ組織の形成は、系の全自由エネルギーが単調減少するように進行するとの考えに基づき、秩序変数の時間発展を計算する。したがって、MPF法は原理的に、エネルギー活性化過程を伴う核形成挙動を取り扱うことができない点がひとつの欠点と言えよう。

本稿で紹介するMPFモデルの場合、系の全自由エネルギーは、次式のギンズブルグーランダウ型の自由エネルギー汎関数として定義される。

$$G = \int_V \left\{ \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \left(-\frac{a_{ij}^2}{2} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j \right) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N (W_{ij} \phi_i \phi_j) + g_{chem}(C_i, T) + \lambda \left(\sum_{i=1}^N \phi_i(x,t) - 1 \right) \right\} dV \dots\dots\dots (2)$$

ここで、右辺の被積分項の第一項は、勾配エネルギー密度と呼ばれ、ミクロ組織中に界面が存在することで生じるエネルギー量を表す。第二項は、ダブルウェルポテンシャルと呼び、異なる結晶粒が同じ座標に存在することを防ぐペナルティ項である。第三項は、化学的自由エネルギー密度であり、Thermo-calc.などの熱力学データベースとカップリングして計算する方法³¹⁾やCALPHAD法で導かれる化学的自由エネルギー関数を直接導入する方法⁸⁾が提案されている。本稿で解説することはできないが、化学的自由エネルギーの他

にも、弾性ひずみエネルギーや電磁気エネルギーなどを含めることもできる。弾性ひずみエネルギーの評価方法や計算方法については、小山らの教科書³²⁾を参照されたい。また、式(2)の右辺第四項は、2.1節で述べたフェーズフィールド変数の制約条件を満足させるために導入されており、 λ はラグランジュの未定数乗数である。さらに、 a_{ij} と W_{ij} は、それぞれ勾配係数、ポテンシャル障壁高さと呼ばれるパラメータであり、2.4節で説明するように物性値と関係付けられる。

2.3 秩序変数の時間発展方程式の導出

任意座標におけるフェーズフィールド変数 ϕ_i の時間変化を表す時間発展方程式は、次式で与えられる。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{N} \sum_{j \neq i}^N M_{ij}^\phi \left(\frac{\delta G}{\delta \phi_i} - \frac{\delta G}{\delta \phi_j} \right) \dots\dots\dots (3)$$

ここで、 M_{ij}^ϕ は ϕ_i の変化を規定するフェーズフィールドモビリティである。ここに、式(2)の全自由エネルギー G を代入することで、ラグランジュの未定乗数 λ は相殺され、次式が得られる。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{N} \sum_{j \neq i}^N M_{ij}^\phi \left[\sum_{k=1}^N \left(\frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{jk}^2) \nabla^2 \phi_k + (W_{ik} - W_{jk}) \phi_k \right) + \left(\frac{\partial g_{chem}}{\partial \phi_i} - \frac{\partial g_{chem}}{\partial \phi_j} \right) \right] \dots\dots\dots (4)$$

化学的自由エネルギー密度が、溶質濃度や温度の関数として与えられる場合、式(4)の右辺第二項はその具体形を導出できるが、次式のように計算されることも多い。

$$\frac{\partial g_{chem}}{\partial \phi_i} - \frac{\partial g_{chem}}{\partial \phi_j} = -\frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta E_{ij} \dots\dots\dots (5)$$

ここで、 ΔE_{ij} はマイクロ組織形成における界面移動の化学的駆動力の大きさを表し、式(5)を用いることで界面領域における駆動力の積分値が ΔE_{ij} となる。

一方、式(1)で定義した溶質元素 i の濃度 C_i の変化は、次式の拡散方程式により計算される。

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ \sum_{\eta=1}^N \phi_\eta \left(\sum_{j=1}^n D_{ij}^\eta \nabla c_j^\eta \right) \right\} \dots\dots\dots (6)$$

ここで、 D_{ij}^η は結晶粒 η における溶質元素 j の拡散係数である。式(6)を計算するためには、局所濃度が必要となる。現在、世界で唯一の市販のMPFシミュレーションソフトウェアであるMICRESS³³⁾では、各相での全ての溶質元素の拡散ポテンシャルが等しい擬平衡の条件を仮定し、局所濃度を計算している³⁴⁾。ごく最近では、擬平衡の仮定を用いずに、非平衡状態で進行するマイクロ組織形成を解析するためのMPF

モデルが提案されている^{35,36)}。

2.4 パラメータと物性値の関係付け

式(4)で示した ϕ_i の時間発展方程式の計算に必要なパラメータである a_{ij} と W_{ij} は、定常状態における界面領域を考慮することにより、次式のように物性値と関係付けられる²⁷⁾。

$$W_{ij} = \frac{4\sigma_{ij}}{\delta} \dots\dots\dots (7)$$

$$a_{ij} = \frac{2\sqrt{2\delta\sigma_{ij}}}{\pi} \dots\dots\dots (8)$$

ここで、 σ_{ij} は粒番号 i と粒番号 j の結晶粒がなす界面の界面エネルギー、 δ は界面幅である。さらに、式(4)のフェーズフィールドモビリティに関しては、次式で与えられる。

$$M_{ij}^\phi = \frac{\pi^2}{8\delta} M_{ij} \dots\dots\dots (9)$$

ここで、 M_{ij} は粒番号 i と粒番号 j の結晶粒がなす界面の易動度である。

2.5 数値シミュレーションのための離散化

MPF法を用いたマイクロ組織形成の数値シミュレーションにおいては、式(4)と式(6)で示した秩序変数の時間発展方程式の時間、空間微分項を差分法で離散化し、数値計算を行う。著者らは、時間微分については、1次精度の前進差分法、空間微分は2次精度の中央差分法で離散化している。この他、有限要素法³⁷⁾やフーリエ変換³⁸⁾を用いた計算方法も提案されている。

3 鉄鋼材料の固相変態によるマイクロ組織形成の数値シミュレーション

3.1 オーステナイト→フェライト変態

鉄鋼材料中で生じる固相変態のうち、最も基本的なものとしてオーステナイト→フェライト変態がある。一般に、フェライト変態は、オーステナイト相の粒界にフェライト相が核形成し、溶質原子の拡散を伴いながら成長する。したがって、MPF法でフェライト変態を解析するためには、フェライト相の核形成を表現する必要があるが、2.2節で述べたように、MPF法では核形成挙動を扱うことはできない。そこで著者らは、結晶塑性有限要素(CPFE)法と古典的核形成理論を用いて、オーステナイト相中のフェライト相の核形成サイトの推定と核形成速度を計算することで、フェライト相の核形成・成長挙動を表現する方法を提案した。以下では、この方法を用いてFe-0.15wt.%C合金におけるフェライト変態の

MPFシミュレーションを行った結果³⁹⁾を紹介する。

本シミュレーションでは、はじめにオーステナイト相に平面ひずみ圧縮変形を与えるCPFEシミュレーションを行い、変形したオーステナイト相内部の蓄積エネルギーや結晶方位を計算した。図2は、CPFEシミュレーションで得られた、ひずみ20%のときのオーステナイト相中の蓄積エネルギーと結晶方位の分布である。ここで、変形前の解析領域の大きさは $128 \times 128 \mu\text{m}^2$ であり、 128^2 のクストライアングル要素を用いて要素分割した。図2の結果より、オーステナイト相に圧縮変形を与えることで、オーステナイト相の粒界近傍で転位密度が増加するのみならず、粒内部にも高い蓄積エネルギーと大きな結晶方位変化が生じている領域が形成され、変形帯が導入されたことを表している。

次に、図2に示した蓄積エネルギーと結晶方位の分布を用いて、フェライト相の核形成サイトを推定し、さらに梅本⁴⁰⁾の核形成モデルに従い、次式によりフェライト相の核形成速度を計算した。

$$I^i = \frac{K_1^i D_v}{\sqrt{kT}} \exp\left(-\frac{K_2}{kT\Delta G_v}\right) \dots\dots\dots (10)$$

ここで、 I^i は単位時間、単位オーステナイト粒界面積あたりに形成するフェライト粒の個数である。上付き添え字 i は、核形成サイトの種類を示し、 $i=1$ でオーステナイト相の粒界、 $i=2$ でオーステナイト相の粒内の核形成サイトを表す。 K_1^i は核形成サイトの密度に関するパラメータである。また、 D_v 、 k 、 T は、それぞれオーステナイト相における炭素原子の拡散係数、ボルツマン定数、温度である。 K_2 は、オーステナイト／フェライト界面の界面エネルギーに関する定数である。また、 ΔG_v はフェライト相の核形成の駆動力であり、温度と炭素濃度の関数として与えられる。さらに、フェライト相の核形成サイトを推定するために、フェライト相が核形成する条

件として、変形により10度以上の結晶方位変化が生じ、かつ蓄積エネルギーが5MPa以上の箇所とした。また、蓄積エネルギーが大きい箇所から順に核形成するものとした。

図2に示した状態のオーステナイト相を、温度1100 Kから1000 Kまで、冷却速度5 K/sで連続冷却したときに生じるフェライト相形成のMPFシミュレーションの結果を図3に示す。図3上段では、各座標でフェーズフィールド変数 ϕ_i の値が最大値となる粒番号に従って各結晶粒を色付けしており、薄い灰色の領域はオーステナイト相、濃い灰色の領域はフェライト相を表している。図3下段は、炭素濃度分布を示しており、実線は結晶粒界を表している。温度の低下とともに、フェライト相はオーステナイト相の粒界に核形成し、その後は粒内にも核形成することがわかる。また、炭素原子はフェライト相からオーステナイト相へと拡散するため、オーステナイト相において炭素濃度が増加している様子が計算されている。

ここで紹介したフェライト変態のみならず、鉄鋼材料の固相変態では結晶粒界や結晶欠陥で新相の核形成が生じる。したがって、鉄鋼材料のマイクロ組織の形態や分布を正確に解析するためには、MPFシミュレーションにおいて核形成挙動を正確に表現することが非常に重要であり、CPFE法などの変形解析手法と連成することで、MPF法では扱うことができない核形成挙動を表現することが可能となる。

ここまでは、MPF法によるフェライト変態の二次元シミュレーションを紹介したが、実際のマイクロ組織形成は三次元空間で生じている。したがって、より現実に近い条件で、フェライト変態を解析するためには、MPFシミュレーションの三次元計算が必要である。しかしながら、MPF法では複数の秩序変数の時間発展方程式を計算する必要があるため、三次元シミュレーションを行う場合、大きな計算コストが問題となる。そこで著者らは、数値シミュレーションを飛躍的

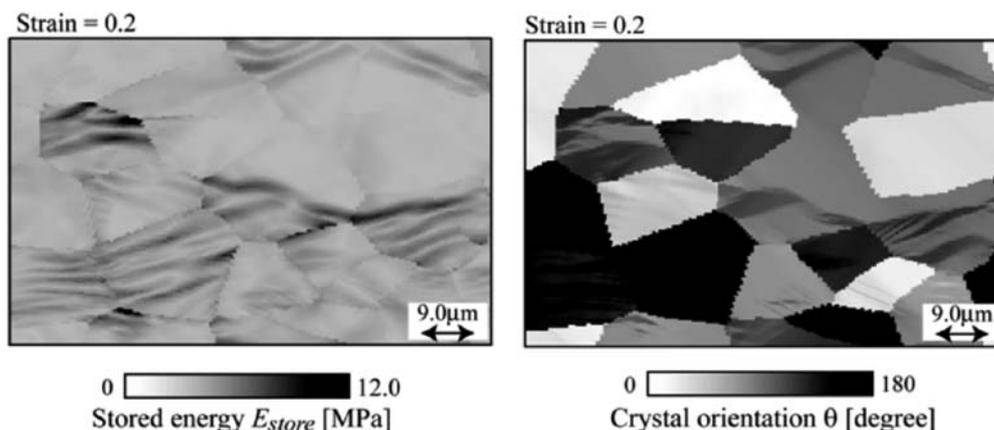


図2 ひずみ20%まで平面ひずみ圧縮変形したオーステナイト相中の蓄積エネルギー（左図）および結晶方位の分布（右図）

に高速化するハードウェアとして注目されている画像処理装置 (Graphics Processing Unit: GPU) を用いて、MPFシミュレーションの三次元計算を高速化する研究を行っている⁴¹⁾。

図4は、2台のGPUを用いて計算したFe-0.15wt.%Cにおけるフェライト変態の三次元MPFシミュレーションの結果である。ここで、解析領域の大きさは $12.8 \times 12.8 \times 12.8 \mu\text{m}^3$ であり、 128^3 の規則差分格子を用いている。図4上段では、フェライト相について各座標でフェーズフィールド変数 ϕ_i の値が最大値となる粒番号に従って各結晶粒をグレースケールで色付けしており、半透明の薄い灰色の面コンターはオーステナイト粒界を表している。このシミュレーションでは、フェ

ライト相の核形成はオーステナイト相の粒界上でランダムに生じると仮定している。三次元シミュレーションを行うことにより、実験では直接観察することが困難なフェライト相の三次元的形態変化やそれに伴う炭素濃度変化をシミュレートすることができる。また、GPUを用いることで通常のCPUを用いた計算に比べて10倍以上の高速化が可能である⁴²⁾。しかしながら、2台のGPUを用いた計算でも、フェライト相の結晶粒径や体積分率変化を統計的に正しく評価するために十分な大きさの解析領域は扱えず、数十個程度のフェライト相の成長を計算できる程度である。したがって、最近では東京工業大学のGPUスーパーコンピュータ-TSUBAME2.5

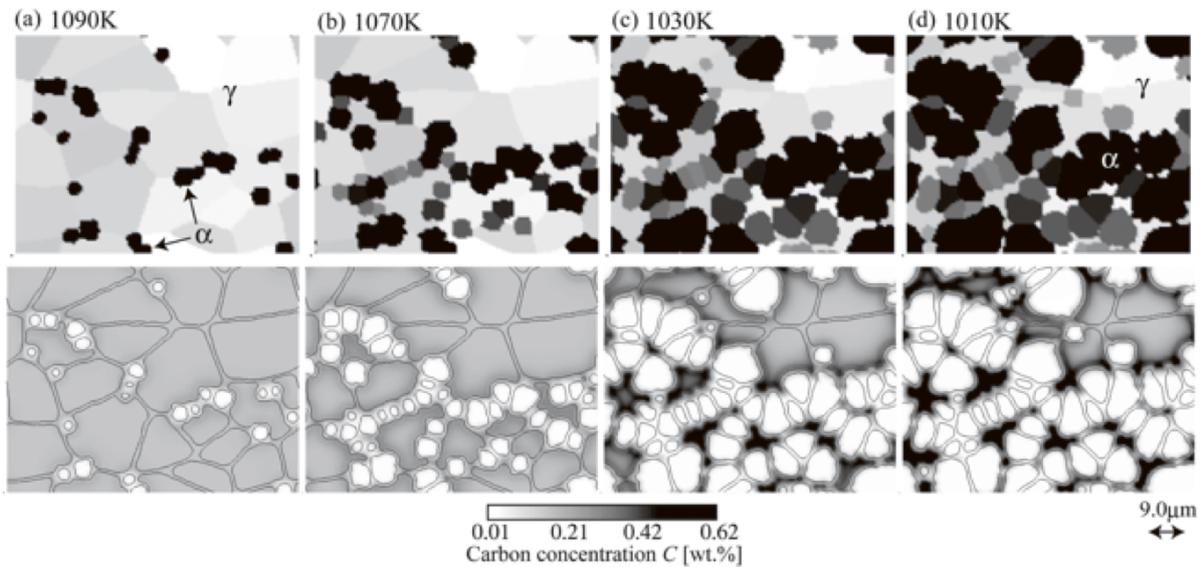


図3 平面ひずみ圧縮変形したオーステナイト相の連続冷却過程で生じるフェライト相の形成過程 (上段) と炭素濃度変化 (下段)

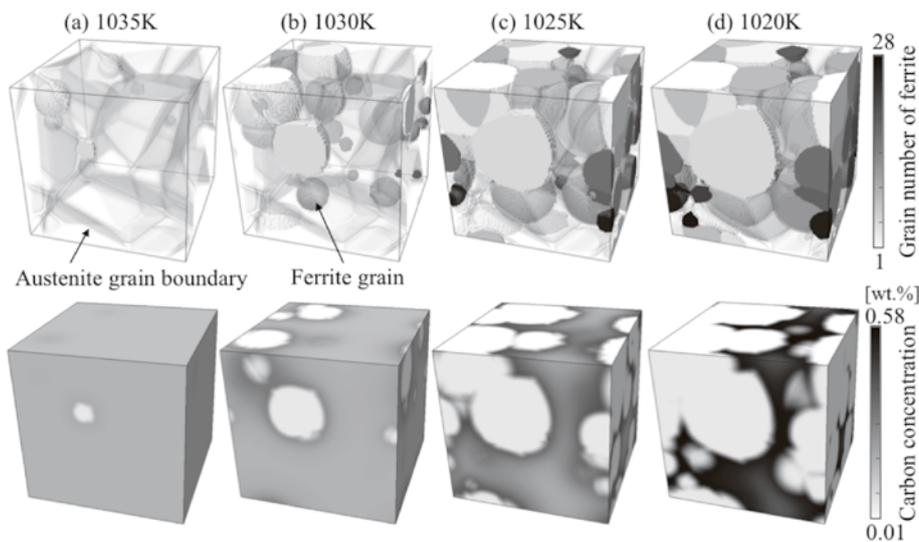


図4 Fe-0.15wt.%C合金におけるフェライト変態の三次元MPFシミュレーションで得られるフェライト相の形成過程 (上段) と炭素濃度変化 (下段)

を用いた超高速計算を行い、より実際に近い条件でMPFシミュレーションを行っている⁴³⁾。

3.2 動的フェライト変態シミュレーション

フェライト相の結晶粒径を微細化することは、鉄鋼材料の強度向上に非常に有効である。近年、低炭素鋼におけるフェライト粒径の超微細化法として、動的ひずみ誘起フェライト変態 (Dynamic Deformation-induced Ferrite Transformation; DIFT) が注目され、盛んに研究されている^{44,45)}。DIFTは、変形と相変態や再結晶によるマイクロ組織形成が同時に生じる非常に複雑な現象であるため、MC法やCA法を用いたDIFT挙動のシミュレーションも行われている^{46,47)}。ここでは、著者ら^{48,49)}の動的再結晶のMPFモデルを応用した、DIFTのMPFモデルとシミュレーション例を紹介する^{50,51)}。

DIFTのMPFモデルにおいても、フェライト相の核形成サイトは、オーステナイト相の粒界とオーステナイト粒内に生じた転位や変形帯であるとし、式(11)に示す核形成速度の式を用いた。ただし、核形成の駆動力は化学的駆動力 ΔG と機械的駆動力、すなわちDIFTにおける変形により材料中に発生する蓄積エネルギー E_{def} の和で与えられるものとした。また、ひずみとひずみ速度が増加するほど、オーステナイト相の粒界および粒内でのフェライト相の核形成が促進されるように、 K_1^i を変更した⁵⁰⁾。DIFTにおける変形により材料中に発生する蓄積エネルギーは、次式のKocks-Mecking (KM)モデル⁵²⁾を用いて、各結晶粒中の転位密度 ρ_i の変化を計算することにより求めた。

$$\frac{d\rho_i}{d\varepsilon} = k_1\sqrt{\rho_i} - k_2\rho_i \dots\dots\dots (11)$$

ここで、 ε は真ひずみ、 k_1 は転位蓄積による加工硬化を規定する定数、 k_2 は動的回復を表す定数である。KMモデルで得られる各結晶粒内での転位密度を平均化した値 ρ_{ave} を用いれば、材料中に生じる蓄積エネルギー E_{def} は次式で与えられる。

$$E_{def} = \frac{1}{2} \mu_{ave} \rho_{ave} b^2 v_m \dots\dots\dots (12)$$

ここで、 b および v_m はそれぞれ、バーガースベクトルの大きさ、鉄のモル体積である。 μ_{ave} はせん断弾性係数であり、フェライト相とオーステナイト相のせん断弾性係数をMPFシミュレーションで計算されるフェライト相の体積分率 V_f で重み付け和した値として計算する。さらに、DIFTによる流動応力(真応力) σ の変化は、 ρ_{ave} を用いて次式で表現する。

$$\sigma = \frac{1}{2} \mu_{ave} b \sqrt{\rho_{ave}} \dots\dots\dots (13)$$

本研究では、このMPFモデルを用いて炭素濃度0.15 wt.%Cの低炭素鋼を1023Kで単軸圧縮変形させたときに生じるDIFTのシミュレーションを行った。シミュレーションに用いた解析領域の大きさは $51.2 \times 51.2 \mu\text{m}^2$ であり、 512×512 の規則差分格子を用いた。計算領域内には、ランダムな結晶方位をもつ50個の結晶粒からなるオーステナイト相を初期配置し、ひずみ速度 $\dot{\varepsilon} = 0.1 \text{ s}^{-1}$ で単軸圧縮変形を与えるシミュレーションを行った。また、式(11)に必要なパラメータ k_1 と k_2 は、Choiら⁵³⁾の実験で得られている流動応力-真ひずみ曲線に基づき決定した。図5にDIFTのMPFシミュレーションで得られた真応力-真ひずみ曲線を示す。ひずみの増加とともに、加工硬化が生じ流動応力は増加するが、DIFTにより形成したフェライト相の体積分率が増えるに従い流動応力が減少するというDIFTに特徴的な軟化現象を再現できていることがわかる。また、図6に、図5中の(a)～(d)で示した各ひずみにおけるフェライト相、炭素濃度および転位密度の分布を示す。図6上段では、フェライト相を灰色、オーステナイト粒界を実線で示しており、 0.1 s^{-1} のような低ひずみ速度ではオーステナイト粒内に核形成するフェライト相は少なく、ほとんどがオーステナイト相の粒界に核形成し、粒界を埋め尽くすようにフェライト相が形成されることがわかる。また、図6中段に示すように、フェライト相の成長とともにオーステナイト相で炭素濃度が増加するために、オーステナイト粒内ではフェライト相の形成が抑制される。本研究で用いたMPFモデルでは、図6下段に示したように各結晶粒内で転位密度が均一に増加するが、実際にはオーステナイト粒内にせん断帯など不均一変形場が形成され、そこに新たなフェライト相が形成される⁴⁵⁾。最近では、MPF法と弾塑性・結晶塑性有限要素法を組み合わせたシミュレーション法^{54,55)}

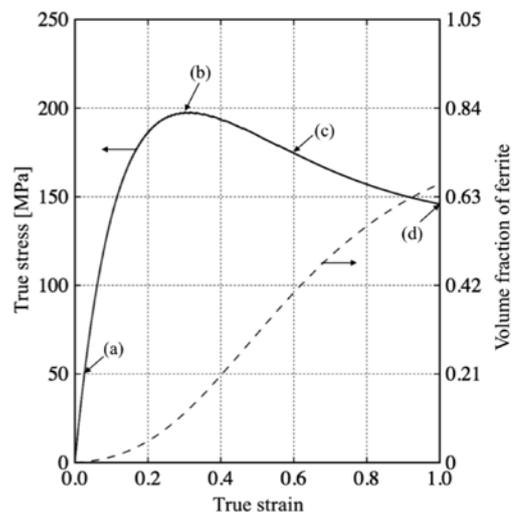


図5 DIFTのMPFシミュレーションで得られる真応力-真ひずみ曲線

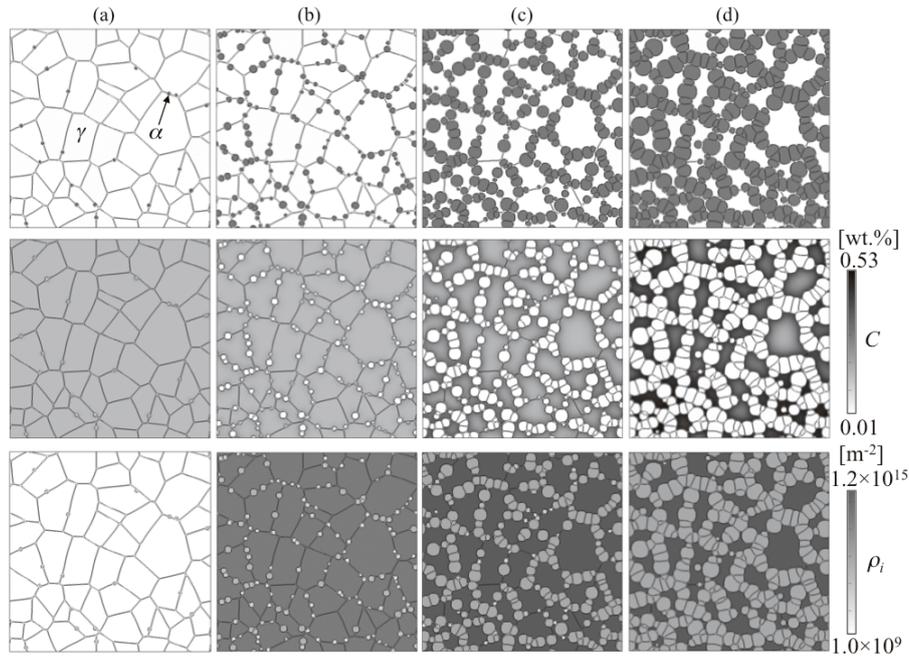


図6 DIFTにおけるフェライト相 (上段)、炭素濃度 (中段) および転位密度 (下段) の変化

も提案されており、今後の研究で動的再結晶や動的フェライト変態のような塑性変形と組織形成が同時進行する現象のシミュレーションへの適用が進むことが期待される。

3.3 MPF法で得られるマイクロ組織形態情報を用いた鉄鋼材料の力学特性評価

ここまでで紹介してきたように、MPF法を用いたマイクロ組織形成シミュレーションの計算結果として、マイクロ組織の分布や形態の二次元または三次元データを得ることができる。したがって、得られたマイクロ組織形態データに基づき、そのマイクロ組織を表すRVEを作成し、それに仮想的に変形を与えるシミュレーション (数値材料試験) を行えば、MPF法により得られたマイクロ組織形態に依存した鉄鋼材料の力学特性を評価することができる。ここでは、3.1節で示したフェライト相の二次元および三次元形態データを用いたDP鋼の数値材料試験の例を紹介する⁵⁶⁾。

図7は、図3 (d) に示したフェライト相を含む、フェライト+マルテンサイト二相組織に単軸引張変形を与える数値材料試験で得られた真応力-真ひずみ曲線である。ここで、数値材料試験には数学的均質化法⁵⁷⁾に基づくCPFE法を用いた。また、図3 (d) において残留オーステナイト相と示した領域は、数値材料試験の際には、すべてマルテンサイト相であると仮定した。図8に、真ひずみ0.1における、組織内の相当応力および相当塑性ひずみの分布を示す。マルテンサイト相では、高い応力を示す一方で、軟質なフェライト相で大きな塑性ひずみが生じることがわかる。

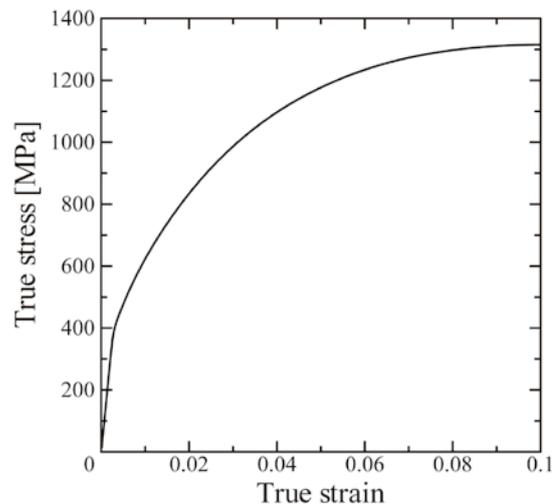


図7 数学的均質化法に基づくCPFE法による数値材料試験で得られるDP鋼の真応力-真ひずみ曲線

数学的均質化法を用いることで、Taylorモデルのようなひずみ一定の仮定やSachsモデルのような応力一定といった仮定を必要とせず、マイクロ組織形態に依存したマイクロおよびマクロスケールの変形挙動を数学的に整合した形で解析することができる。しかしながら、数学的均質化法では、マイクロスケールとマクロスケールの両方で境界値問題を解く必要があるため、三次元シミュレーションやマクロモデルが多数の有限要素で構成される場合には、計算コストが大きくなり、並列計算などの工夫が必要となる⁵⁸⁾。

これに対して、著者らは高速フーリエ変換を境界値問題の

ソルバーに用いる結晶塑性解析 (CPFET) 法⁵⁹⁻⁶⁰⁾を用いて、MPF法で得られるマイクロ組織の三次元形態を考慮した鉄鋼材料の数値材料試験を行っている。以下では、図4で紹介したようなMPFシミュレーションで得られるフェライト相を内部組織として有するDP鋼の数値材料試験の例を紹介する。図9 (b) (c) は、MPF法で得られたフェライト相の三次元形態 (図9 (a)) を含むDP鋼に単軸引張変形を与える数値材料試験を行って得られた、マイクロ組織中の相当応力と蓄積塑性せん断ひずみの分布である。図8で示した結果と同様に、マルテンサイト相では高い応力を示し、フェライト相とマルテンサイト相の界面近傍でひずみが集中することがわかる。CPFET法では、CPFE法に比べて1000倍以上も高速であることが報告されている⁶¹⁾。したがって、マイクロ組織内部の応力やひずみの三次元分布を評価する計算方法として非常に有効である。

4 おわりに

本稿では、MPF法を用いた鉄鋼材料の固相変態の数値シミュレーションとその結果として得られるマイクロ組織形態を用いた力学特性評価に関する著者らの研究内容を紹介した。上述のように、MPF法を用いることで鉄鋼材料中のフェライト相、パーライト相、マルテンサイト相の様々なマイクロ組織形成を解析することが可能となっており、有限要素法などの変形シミュレーション法と組み合わせることで、鉄鋼材料のマイクロ組織と力学特性の関係を理解し、予測するための主要な数値シミュレーション法として定着しつつある。しかしながら、実際のDP鋼やTRIP鋼中の複相組織の形成やその変形挙動を解析可能とし、新しい鉄鋼材料の開発や既存材料の高強度化のために活用するには、未だ解決すべき問題が多いと言えよう。

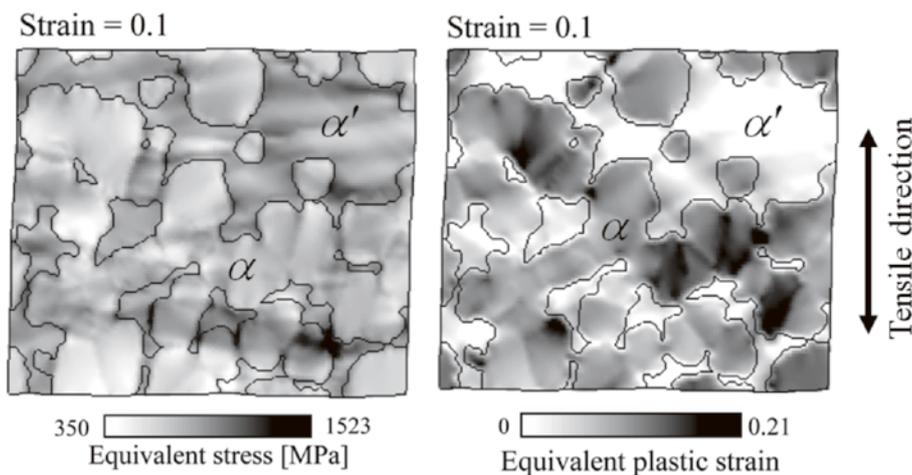


図8 真ひずみ0.1におけるDP鋼のマイクロ組織中の相当応力分布 (左図) および相当塑性ひずみ分布 (右図)

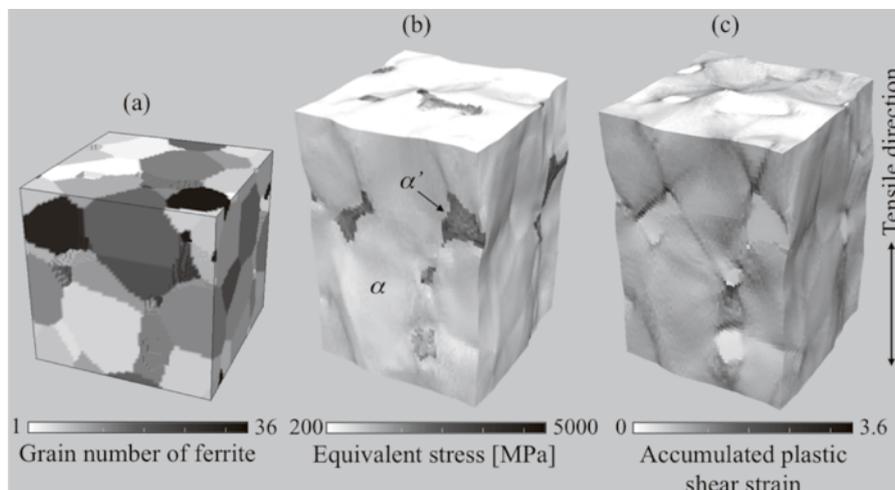


図9 (a) MPF法により得られたフェライト相の3次元形態とCPFET法によるDP鋼の数値材料試験で得られるマイクロ組織中の (b) 相当応力と (c) 蓄積塑性せん断ひずみの分布

MPF法の今後の課題としては、多元合金鋼中で生じるミクロ組織形成をより柔軟に扱えるMPFモデルの確立が必要であり、Thermo-calc.などの熱力学データベースと連携する方法や最近Steinbachらが提案した非平衡MPFモデル^{35,36)}が有効であると思われる。また、MPF法で定量的なシミュレーション結果を得るためには、MPF法における核形成挙動の取り扱いの検討や、様々な鋼種に対する界面エネルギーや界面モビリティなどの物性値のデータベースの構築も重要である。一方、ミクロ組織に依存した鉄鋼材料の力学特性を評価するためには、CPFE法やCPFFT法が有効であると考えているが、これについても定量的なシミュレーション結果を得るためには、実験結果と比較検討し、物性値やパラメータを同定する必要がある。

最近では、鉄鋼材料中のミクロ組織形態や変形挙動を三次元で直接観察し、解析する実験技術も著しく発展している⁶²⁻⁶⁴⁾。こうした最新の実験により得られる知見を活用することで、鉄鋼材料のミクロ組織と力学特性を解析するための数値シミュレーション法は今後さらに発展すると思われる。

参考文献

- 藤田展弘, 楠見和久, 松村賢一郎, 野中俊樹, 友清寿雅: 新日鉄技報, 393 (2012), 99.
- 友田陽, 田村今男: 鉄と鋼, 67 (1982), 1147.
- 杉本公一, 白井登, 小林光征, 橋本俊一: 鉄と鋼, 78, (1992), 1480.
- 例えば, 米国Materials Genome Initiative, <http://www.whitehouse.gov/mgi>
- R.Kobayashi: Physica D, 63 (1993), 410.
- I.Steinbach, F.Pezzolla, B.Nestler, M.Seesselberg, R.Prieler, G.J.Schmitz and J.L.L.Rezende: Physica D, 94 (1996), 135.
- J.Tiaden, B.Nestler, H.J.Diepers and I.Steinbach: Physica D, 115 (1998), 73.
- I.Loginova, J.Agren and G.Amberg: Acta Mater., 51 (2003), 1327.
- M.G.Mecozi, J.Sietsma and S.van der Zwaag: Acta Mater., 54 (2006), 1431.
- M.Militzer, M.G.Mecozi, J.Sietsma and S.van der Zwaag: Acta Mater., 54 (2006), 3961.
- K.Nakajima, M.Apel and I.Steinbach: Acta Mater., 54 (2006), 3665.
- I.Steinbach and M.Apel: Acta Mater., 55 (2007), 4817.
- Y.Wang and A.G.Khachaturyan: Acta Mater., 45 (1997), 759.
- A.Yamanaka, T.Takaki and Y.Tomita: Mater.Sci.Eng.A, 491 (2009), 378.
- Z.Cong, Y.Murata, Y.Tsukada and T.Koyama: Philos. Mag., 93 (2013), 1739.
- A.Yamanaka, T.Takaki and Y.Tomita: Mater.Sci.Eng.A, 480 (2008), 244.
- A.Yamanaka and T.Takaki: Int.J.Auto.Tech., 7 (2013), 16.
- B.S.Fromm, K.Chang and D.L.McDowell, L-Q.Chen, H.Garmestani: Acta Mater., 60 (2012), 5984.
- T.Koyama: ISIJ Int., 52 (2012), 891.
- L-Q.Chen: Chin.Sci.Bull., 59 (2014), 1641.
- L-Q.Chen: Ann.Rev.Mater.Res., 32 (2002), 113.
- I.Steinbach: Ann.Rev.Mater.Res., 43 (2013), 89.
- M.Militzer: Curr.Opin.Solid State Mater.Sci., 15 (2011), 106.
- 小山敏幸: ふえらむ, 9 (2004), 905.
- 小山敏幸: ふえらむ, 9 (2004), 240, 301, 376, 497.
- 高木知弘, 山中晃徳: 塑性と加工, 54 (2013), 906.
- 高木知弘, 山中晃徳: フェーズフィールド法-数値シミュレーションによる材料組織設計-, 養賢堂, (2012)
- I.Steinbach and F.Pezolla: Physica D, 134 (1999), 385.
- A.Yamanaka, T.Takaki and Y.Tomita: J.Crystal Growth, 310 (2008), 1337.
- I.Steinbach, B.Bottger, J.Eiken, N.Warnken and S.G.Fries: J.Phase Equil.Diff., 28 (2007), 101.
- S.G.Fries, B.Bottger, J.Eiken and I.Steinbach: Int.J.Mater. Res., 100 (2009), 128.
- 小山敏幸, 塚田祐貴: 材料組織弾性学と組織形成, 内田老鶴圃, (2012)
- ACCESS e.V社, <http://www.micress.de>
- 福元成雄, 野本祐春, 日本金属学会誌, 73 (2009), 502.
- I.Steinbach, L.Zhang and M.Plapp: Acta Mater., 60 (2012), 2689.
- L.Zhang and I.Steinbach: Acta Mater., 60 (2012), 2702.
- T.Takaki, T.Fukuoka and Y.Tomita: J.Crystal Growth, 283 (2005), 263.
- L-Q.Chen and J.Shen: Comput.Phys.Comm., 108 (1998), 147.
- A.Yamanaka, T.Takaki and Y.Tomita: ISIJ Int., 52 (2012), 659.
- M.Umemoto, Z.H.Guo and I.Tamura: Mater.Sci.Tech., 3 (1987), 249.
- 山中晃徳, 小川慧, 青木尊之: 日本計算工学会論文集, 2010 (2010), 20100009.
- A.Yamanaka, T.Takaki, T.Aoki and T.Shimokawabe: J.Comput.Sci.Tehno., 6 (2012), 3995.

- 43) 岡本成史, 山中晃徳, 下川辺隆史, 青木尊之: 日本計算工学会論文集, 2013 (2013), 20130018.
- 44) P.D.Hodgson, M.R.Hichson and R.K.Gibbs: Scripta Mater., 40 (1999), 1179.
- 45) N.Park, A.Shibata, D.Terada and N.Tsuji: Acta Mater., 61 (2013), 163.
- 46) M.Tong, J.Ni, Y.Zhang, D.Li and Y.Li: Metall.Mater. Trans.A, 35A (2004), 1565.
- 47) C.Zheng, D.Li, L.Shanping and Y.Li: Scripta Mater., 58 (2008), 838.
- 48) T.Takaki, T.Hirouchi, Y.Hisakuni, A.Yamanaka and Y.Tomita: Mater.Trans., 49 (2008), 2559.
- 49) T.Takaki, Y.Hisakuni, T.Hirouchi and A.Yamanaka, Y.Tomita: Comp.Mater.Sci., 45 (2009), 881.
- 50) A.Yamanaka and T.Takaki: ISIJ Int., 54 (2014) 12, in print.
- 51) A.Yamanaka and T.Takaki: Key Eng.Mater., 626 (2015), 81.
- 52) H.Mecking and U.F.Kocks: Acta Metall., 29, (1981), 1865.
- 53) J-K.Choi, D-H.Seo, J-S.Lee, K-K.Um and W-Y.Choo: ISIJ Int., 43, (2003), 746.
- 54) T.Takaki, C.Yoshimoto, A.Yamanaka and Y.Tomita: Int. J.Plast.52, (2014), 105.
- 55) G.Abrivard, E.P.Busso, S.Forest and B.Appolaire: Philos.Mag., 92 (2012), 3618.
- 56) 山中晃徳: 溶接構造シンポジウム2011講演論文集, (2011), 199.
- 57) 寺田賢二郎, 菊池昇: 均質化法入門, (2003), 丸善.
- 58) 牧野孝久, 宇尾朋之, 樫山和男: 計算工学会講演会論文集, 3 (1998), 1034.
- 59) H.Moulinec, P.Suquet and Comput.Methods: Appl. Mech.Engrg., 157 (1998), 69.
- 60) R.A.Lebensohn: Acta Mater., 49 (2001), 2723.
- 61) P.Eisenlohr, M.Diehl, R.A.Lebensohn and F.Roters: Int. J.Plast., 46, (2013), 37.
- 62) N.Sato, Y.Adachi, H.Kawata and K.Kaneko: ISIJ Int., 52, (2012), 1362.
- 63) 諸岡聡, 梅澤修, ステファヌス・ハルヨ, 長谷川浩平, 田路勇樹: 鉄と鋼, 98 (2012), 311.
- 64) H.Toda, K.Uesugi, A.Takeuchi, K.Minami, M.Kobayashi and T.Kobayashi: Appl.Phys.Lett., 89 (2006), 143112.

(2014年6月4日受付)