

フェーズフィールドモデルを用いた変態-熱-応力連成解析の定式化*

上原拓也*¹, 辻野貴洋*²Formulation of the Coupling Effects among Phase, Temperature
and Stress by Using the Phase Field ModelTakuya UEHARA*³ and Takahiro TSUJINO*³ Department of Computational Science and Engineering, Nagoya University,
Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya-shi, Aichi, 464-8603 Japan

Fundamental equations for the simulation of phase transformation process by using the phase field model is derived. Compared to the conventional metallo-thermo-mechanical coupling equations, based on the volume fractions of every phases, the advantage of the phase field model is that this model can treat a dynamic evolution of the two-phase interface. Therefore, complicated stress distribution in the microstructure formed by heat treatment can be simulated. The derivation is achieved based on Gibbs free energy definition and the second law of the thermodynamics. The phase field equation includes the effect of stress-induced transformation as well as thermally driven transformation. In the stress-strain relationship, the elasto-plastic behavior is considered, which enables the evaluation of the residual stress distribution in the microstructure.

Key Words: Computational Mechanics, Thermal Stress, Residual Stress, Phase Field Model, Phase Transformation, Coupling Effects, Thermodynamics

1. 緒 言

工学的に利用される材料の機械的・力学的特性は、微視的な内部構造や内部組織に大きく影響される。微視的な内部構造としては、原子スケールにおける結晶構造、格子欠陥、転位の運動から、粒界すべりなどのメゾスケールまで、広範囲にわたるため、それらすべてを考慮した解析モデルの構築は簡単ではない。分子動力学などによって、物理的に現象を捉え、理解することはきわめて重要である一方、経験的にパラメータのフィッティングを行った構成式を用いた有限要素解析が工学分野で広く利用されていることからわかるように、工学機器の設計においては現実のスケールでの解析が必要とされている。このような立場においても、近年の工学製品の微小化によって、結晶粒スケールの現象はもはや無視することはできず、結晶粒の分布、異方性、再結晶化などの現象が力学的特性を知る上で重要となっている。また、材料の残留応力分布が強度に及ぼす影響については、巨視的には古くから知られているが、微小なスケールになると、結晶粒の生成過

程とリンクさせた応力分布の解析が不可欠である。

そこで本研究では、凝固や熱処理などのプロセスにおいて、微視組織や結晶粒が形成される過程を対象とし、内部組織の形成過程を動的に直接シミュレートすると同時に、応力変化および残留応力分布の解析を行うことを目的とする。本報では、まずその解析のための定式化について報告し、解析例については、続報において報告する⁽¹⁾。

2. フェーズフィールド方程式の導出

2.1 フェーズフィールドモデル フェーズフィールドモデルでは、相の状態を表すためにフェーズフィールドと呼ばれる位置と時間によって決定されるスカラー変数 ϕ を用いる。この値は、図1に示すように、バルク領域では一定値をとり、ある幅をもつ境界領域において連続的に変化する。これによって、不連続な境界がなくなり、各相を区別したり、境界における特別な条件を与えることなく、連続的に扱うことができる。

微視組織の形成は、相変態によって進行するが、変態過程においては、相の変化が温度および応力・ひずみと複雑に影響しながら起こるため、これらの連成を考慮した解析モデルが必要である。連続体的な立場からの相変態解析としては、Johnson-Mehl-Avrami によ

* 原稿受付 2005年6月16日。

¹ 正員, 名古屋大学大学院工学研究科(〒464-8603 名古屋市千種区不老町)。² 京都大学大学院エネルギー科学研究科[現:新日本製鐵(株)(〒671-1188 姫路市広畑区富士町1)]。

E-mail: uehara@mech.nagoya-u.ac.jp

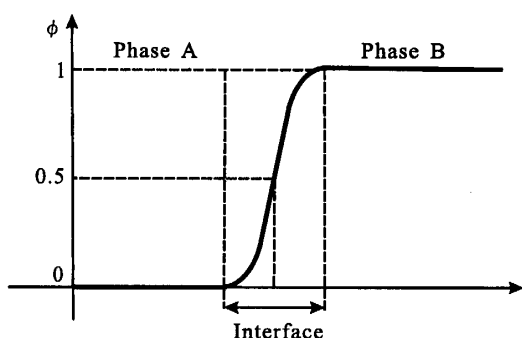


Fig. 1 Schematic illustration of phase field variable.

る変態速度式が有名であり、井上らはこの式を温度解析および応力・ひずみの弾塑性構成式と連成することによって、鋼の熱処理過程における相変態と残留応力分布の解析を行っている⁽²⁾⁻⁽⁴⁾。この変態・熱・力学的手法は、工学分野も含め、広く用いられているが、ここでは相変態を体積分率 ξ の変化として表現しており、異相界面の位置や形状、すなわち、凝固組織や結晶粒が形成される過程や、その組織内部の応力分布を知ることにはできない。

これに対し、フェーズフィールドモデルでは、相変態に伴う界面の移動および形状変化の解析が可能であり、デンドライトのような複雑な形状まで再現することができる⁽⁵⁾⁻⁽⁸⁾。また、ファセット面の形成⁽⁹⁾、多結晶体の形成⁽¹⁰⁾⁻⁽¹²⁾など、様々な組織形成の再現が行われている。応力・ひずみを考慮した解析としては、Kassnerらは、界面に存在する応力やひずみによる界面不安定性をひずみエネルギーを用いて表現しており⁽¹³⁾、小山らは、スピノーダル分解などの相分解現象に対して弾性ひずみの影響を考慮した解析を⁽¹⁴⁾、Khachaturyanらは、与えられた応力下でのマルテンサイト変態の解析⁽¹⁵⁾などを行っている。しかし、これらの計算では、いずれも応力・ひずみ分布の存在が及ぼす相変態への影響については考慮されているが、変態に伴う応力変化の解析や、形成される物体内の残留応力分布などの解析は行われていない。著者らはこれまでに、凝固過程を対象に、液相の応力を無視した簡略的なモデルによる応力変化の解析を行った⁽¹⁶⁾が、ここでは固相変態も想定し、従来のフェーズフィールドモデルに応力の連成を加え、変態-熱-応力の連成解析を行う。

2.2 熱力学第1法則 温度と相変態の連成を考慮したフェーズフィールド方程式については、Wang, Sekerkaらによって、熱力学の第1、第2法則に基づいた導出が行われている⁽⁷⁾⁽¹⁷⁾。ここでは、その導出過程に従いつつ、応力・ひずみの効果を加えることによって、相、温度、応力の連成方程式の導出を行う。

ある系における体積 v をもつ任意の領域を考えると、その領域における内部エネルギー U とエントロピー S は、単位質量あたりの内部エネルギー密度 u 、エントロピー密度 η および密度 ρ を用いて次のように与えることができる。

$$U = \int_v \rho \left(u + \frac{1}{2} \epsilon_u^2 \left| \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right|^2 \right) dv \quad (1)$$

$$S = \int_v \rho \left(\eta - \frac{1}{2} \epsilon_\eta^2 \left| \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right|^2 \right) dv \quad (2)$$

ここで、各式の被積分項第2項は、Cahn-Hilliard理論によって勾配エネルギー、勾配エントロピーとして与えられる項である。この項は、 ϕ が一様であるバルク領域では0となり、界面領域だけで影響する項である。また、 ϵ_u および ϵ_η は定数であり、勾配エネルギーおよび勾配エントロピーの大きさを決定するパラメータである。

ここで、変形を伴う物体に関するエネルギー保存則を考えると、物体の運動エネルギー K 、内部エネルギー U 、および領域に流入する熱エネルギー Q の時間変化 $(\dot{K}, \dot{U}, \dot{Q})$ と仕事率 $\dot{\Omega}$ について次の関係が成立する。

$$\dot{K} + \dot{U} = \dot{Q} + \dot{\Omega} \quad (3)$$

ここで、微小変形を伴う固体の熱力学を考えると⁽⁴⁾、 K, Q, Ω については次のような形を与えることができる。

$$\dot{K} = \int_v \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v_i v_i \right) dV \quad (4)$$

$$\dot{Q} = \int_A \left(-h_i + \rho \epsilon_u^2 \phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) n_i dA \quad (5)$$

$$\dot{\Omega} = \int_v (\sigma_{ij} v_i)_{,j} dV + \int_v \rho F_i v_i dV \quad (6)$$

ここで v_i は物体の速度、 h_i は領域の表面から流入する熱流束ベクトル、 F_i は単位質量あたりの物体力を表している。また、式(5)の被積分項第2項は、界面での変態に伴う勾配エネルギーの変化量に相当する。いま、式(3)に式(4)-(6)と式(1)の時間変化 \dot{U} を代入し、Gaussの発散定理を用いて整理すると、

$$\int_v \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho u + \frac{1}{2} \rho \epsilon_u^2 \left| \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|^2 \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-h_i + \rho \epsilon_u^2 \phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v_i v_i \right) - (\sigma_{ij} v_i)_{,j} - \rho F_i v_i \right] dV = 0 \quad (7)$$

となる。さらに、運動方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_i) = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho F_i \quad (8)$$

を用いると、式(7)は、

$$\int_v \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho u + \frac{1}{2} \rho \epsilon_u^2 \left| \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|^2 \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-h_i + \rho \epsilon_u^2 \dot{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) - \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij} \right] dV = 0 \quad (9)$$

となる。ただし、 ϵ_{ij} はひずみを表している。この式が任意の領域で成立するためには、被積分項内が0であればよい。また、被積分項の ϕ に関する項を整理し、微小変形であるという条件から、 $\partial(\rho u)/\partial t = \rho \partial u/\partial t$ とすると、エネルギー保存則として、

$$\rho \dot{u} + \frac{\partial h_i}{\partial x_i} - \rho \epsilon_u^2 \dot{\phi} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_i} - \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij} = 0 \quad (10)$$

が得られる。

2.3 熱力学第2法則 エントロピー生成量 Γ は、領域内におけるエントロピーの変化率 \dot{S} と境界面 A からの熱流入を用いて次のように表すことができる。

$$\Gamma = \dot{S} + \int_A \frac{h_i}{T} n_i dA + \int_A \rho \epsilon_\eta^2 \dot{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} n_i dA \quad (11)$$

この式の右辺第一項に、式(2)で定義したエントロピーを代入し、Gaussの発散定理を用いると、熱力学第2法則 $\Gamma \geq 0$ から次の不等式が得られる。

$$\int_v \left[\rho \dot{\eta} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{h_i}{T} \right) + \rho \epsilon_\eta^2 \dot{\phi} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_i} \right] dV \geq 0 \quad (12)$$

この式は任意の領域で成立するため、被積分項について、

$$\rho \dot{\eta} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{h_i}{T} \right) + \rho \epsilon_\eta^2 \dot{\phi} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_i} \geq 0 \quad (13)$$

が成立する。これは、熱力学第2法則の局所形として考えることができる。

ここで、Gibbsの自由エネルギー密度

$$g = u - T\eta - \frac{1}{\rho} \sigma_{ij} \epsilon_{ij}^e \quad (14)$$

を用いて式(13)を变形する。ただし、 ϵ_{ij}^e は弾性ひずみである。このとき、エネルギー保存則(10)を用い、 ϵ_{ij} については、 ϵ_{ij}^e と塑性ひずみ ϵ_{ij}^p を用いて、

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}^e + \epsilon_{ij}^p \quad (15)$$

と表すことができるものとする、

$$-\rho \dot{g} - \rho \eta \dot{T} - \epsilon_{ij}^e \dot{\sigma}_{ij} + \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}^p - \frac{h_i}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \epsilon_g^2 \dot{\phi} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_i} \geq 0 \quad (16)$$

が得られる。ただし、 $\epsilon_g^2 = \epsilon_u^2 + T \epsilon_\eta^2$ である。ここで、Gibbsの自由エネルギー密度 g の時間微分は、

$$\dot{g} = \frac{\partial g}{\partial \sigma_{ij}} \dot{\sigma}_{ij} + \frac{\partial g}{\partial T} \dot{T} + \frac{\partial g}{\partial \phi} \dot{\phi} \quad (17)$$

と表すことができるので、式(16)は、

$$-\rho \left(\epsilon_g^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_i} - \frac{\partial g}{\partial \phi} \right) \dot{\phi} - \rho \left(\eta + \frac{\partial g}{\partial T} \right) \dot{T} - \frac{h_i}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} + \left(\epsilon_{ij}^e + \rho \frac{\partial g}{\partial \sigma_{ij}} \right) \dot{\sigma}_{ij} + \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}^p \geq 0 \quad (18)$$

となる。この式が、任意の相変化、温度変化および応力変化に対して成立するためには、左辺の各項がそれぞれ非負であれば十分であり、以下の式が得られる。

$$\tau \dot{\phi} = \epsilon_g^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_i} - \frac{\partial g}{\partial \phi} \quad (19)$$

$$\eta = - \frac{\partial g}{\partial T} \quad (20)$$

$$\frac{h_i}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} \leq 0 \quad (21)$$

$$\epsilon_{ij}^e = - \rho \frac{\partial g}{\partial \sigma_{ij}} \quad (22)$$

$$\sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}^p \geq 0 \quad (23)$$

ここで、式(19)はフェーズフィールド方程式、式(20)、(21)は熱力学変数に関する条件式、式(22)、(23)は応力・ひずみに関する構成関係をそれぞれ表している。このうち、式(21)については、熱流束ベクトル h_i に対して Fourier の法則

$$h_i = -k \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (24)$$

が成立するとすれば満たされる。また、塑性ひずみに関する式(23)は、最大塑性仕事の原理を考えれば、この条件を満たしていることがわかる。したがって、エネルギー関数 g および u の具体的な関数形を定めれば、式(19)から相変態を表すフェーズフィールド方程式、式(22)から応力・ひずみの構成式、式(10)から熱伝導方程式が導かれ、連成基礎方程式を得ることができる。

2.4 単相状態におけるエネルギー関数の決定 次に、Gibbsの自由エネルギー密度 g の具体的な形式を考える。単相状態における Gibbs の自由エネルギー式(14)の全微分は、弾性変形などの可逆条件下では次のように与えることができる。

$$dg = du - Td\eta - \eta dT - \frac{1}{\rho} \sigma_{ij} d\epsilon_{ij}^e - \frac{1}{\rho} \epsilon_{ij}^e d\sigma_{ij} = -\eta dT - \frac{1}{\rho} \epsilon_{ij}^e d\sigma_{ij} \quad (25)$$

ただし、ここでは、外部からの仕事の影響を受けない場合の内部エネルギー u の時間変化について、

$$du = Td\eta + \frac{1}{\rho} \sigma_{ij} d\epsilon_{ij}^e \quad (26)$$

であることを利用した。また、エントロピー密度 η は、

$$d\eta = \frac{\partial \eta}{\partial T} dT + \frac{\partial \eta}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} \quad (27)$$

と表すことができる。さらに、比熱の定義式、

$$c = T \frac{\partial \eta}{\partial T} \quad (28)$$

と、式(20)および式(22)から導かれる関係、

$$-\rho \frac{\partial^2 g}{\partial T \partial \sigma_{ij}} = \frac{\partial \varepsilon_{ij}^e}{\partial T} = \rho \frac{\partial \eta}{\partial \sigma_{ij}} \quad (29)$$

を用いると、式(27)は、

$$d\eta = \frac{c}{T} dT + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \varepsilon_{ij}^e}{\partial T} d\sigma_{ij} \quad (30)$$

となる。ここに、式(25)を用いると、Gibbsの自由エネルギー密度 g およびエントロピー密度 η はそれぞれ、

$$g = - \int \eta dT - \frac{1}{\rho} \int \varepsilon_{ij}^e d\sigma_{ij} \quad (31)$$

$$\eta = \int \frac{c}{T} dT + \frac{1}{\rho} \int \frac{\partial \varepsilon_{ij}^e}{\partial T} d\sigma_{ij} \quad (32)$$

として求めることができる。また、内部エネルギー密度 u についても式(26)から、

$$u = \int c dT + \int T \frac{\partial \varepsilon_{ij}^e}{\partial T} d\sigma_{ij} + \frac{1}{\rho} \int \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e \quad (33)$$

として求められる。

2.5 2相状態におけるエネルギー関数の決定 質量密度 ρ の領域に2相が存在する問題を考える場合、Gibbsの自由エネルギー密度 g 、内部エネルギー密度 u 、およびエントロピー密度 η は、それぞれ ϕ を用いた関数形で表される必要がある。そこで、 g 、 u および η は、相 A, B のそれぞれのバルク領域における密度、Gibbsの自由エネルギー密度、内部エネルギー密度およびエントロピー密度 ρ_A, g_A, u_A, η_A および ρ_B, g_B, u_B, η_B を用いて次のように表されると仮定する。

$$\rho g = [1 - p(\phi)] \rho_A g_A + p(\phi) \rho_B g_B + w_g d(\phi) \quad (34)$$

$$\rho u = [1 - p(\phi)] \rho_A u_A + p(\phi) \rho_B u_B + w_u d(\phi) \quad (35)$$

$$\rho \eta = [1 - p(\phi)] \rho_A \eta_A + p(\phi) \rho_B \eta_B + w_\eta d(\phi) \quad (36)$$

ここで、関数 $p(\phi)$ は、相 A が $\phi=0$ で表されるとした場合、 $p(0)=0, p(1)=1$ を満たす任意の関数であり、界面領域での物性値の変化を表す関数である。式(34)-(36)の右辺第3項は、界面エネルギーの影響を表しており、 $d(\phi)$ は、 $0 < \phi < 1$ となる界面領域のみで値を持つ関数である。すなわち、 $d(0)=0, d(1)=0$ を満たす関数であることが必要である。また、関数 $d(\phi)$ の係数 w_g 、

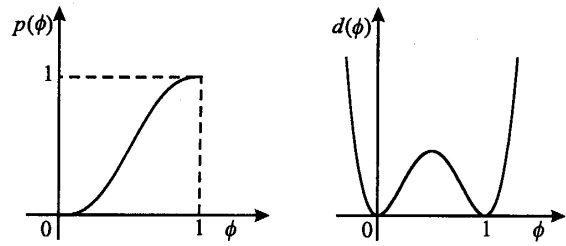


Fig. 2 Illustration of $p(\phi)$ and $d(\phi)$.

w_u および w_η は界面エネルギーの大きさに対応するパラメータである。ただし、 $w_g = w_u - T w_\eta$ である。

関数 $p(\phi), d(\phi)$ の取り方には任意性があるが、例えば、Wangらは、図2に示すような関数

$$p(\phi) = \phi^3(10 - 15\phi + 6\phi^2) \quad (37)$$

$$d(\phi) = \phi^2(1 - \phi)^2 \quad (38)$$

を与えている⁽⁷⁾。また、一般には界面エネルギーに対する応力や温度の影響を組み入れ、これらの関数の変数として、温度や応力を入れることも可能であるが、ここでは ϕ のみの関数としている。

3. 応力と連成した基礎式の定式化

3.1 応力-ひずみ関係式

3.1.1 弾性ひずみ 式(34)-(36)で与えた関係を用いて、応力-ひずみ関係式、フェーズフィールド方程式、および熱伝導方程式を導出する。式(22)に、式(34)で定義したGibbsの自由エネルギー密度を代入すると、相変態を考慮した場合の弾性ひずみ ε_{ij}^e は、

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^e &= -\rho \frac{\partial g}{\partial \sigma_{ij}} \\ &= -(1 - p(\phi)) \rho_A \frac{\partial g_A}{\partial \sigma_{ij}} - p(\phi) \rho_B \frac{\partial g_B}{\partial \sigma_{ij}} \end{aligned} \quad (39)$$

として与えられる。ただし、自由エネルギー式(34)の第3項を ϕ のみの関数としたため、ここではこの項の影響は現れていない。いま、相 A および相 B の単相状態を考えると、

$$\varepsilon_{Iij}^e = -\rho_I \frac{\partial g_I}{\partial \sigma_{ij}} \quad (I = A \text{ or } B) \quad (40)$$

と表すことができるので、弾性ひずみ ε_{ij}^e は、

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^e &= (1 - p(\phi)) \varepsilon_{Aij}^e + p(\phi) \varepsilon_{Bij}^e \\ &= \varepsilon_{Aij}^e + p(\phi) \Delta \varepsilon_{ij}^e \end{aligned} \quad (41)$$

と表される。ただし、 $\Delta \varepsilon_{ij}^e = \varepsilon_{Bij}^e - \varepsilon_{Aij}^e$ である。

単相状態のGibbsの自由エネルギー g_I は、 ϕ の値には依存せず、応力 σ_{ij} と温度 T の関数として与えら

れる。したがって、熱弾性体に対して用いられる従来の弾性ひずみの定義を用いると、

$$\varepsilon_{ij}^e = \frac{1+\nu_I}{E_I} \sigma_{ij} - \frac{\nu_I}{E_I} \sigma_{kk} \delta_{ij} + \alpha_I (T - T_0) \delta_{ij} + \beta_I \delta_{ij} \quad (42)$$

と表すことができる。ただし、 E_I, ν_I および α_I はそれぞれ、相 I の縦弾性係数、ポアソン比および線膨張率である。また、右辺第 4 項は、相 A, B の体積差から生じるひずみである。 β_I は変態線膨張率に相当するが、相 A を基準として考えると、 $\beta_A = 0, \beta_B = \beta$ とすることができる。

ここで、式 (41) の $\Delta \varepsilon_{ij}^e$ は、相 A, B の単相状態で定義されるひずみの差である。これは、変態前後の弾性定数の変化のため応力 σ_{ij} に依存して生じるひずみの差 $\Delta \varepsilon_{ij}^{eD}$ 、変態前後の線膨張率の差によって温度 T に対応して生じるひずみの差 $\Delta \varepsilon_{ij}^{eT}$ 、および変態前後の体積差によって生じるひずみの差 $\Delta \varepsilon_{ij}^{eV}$ の和として、

$$\Delta \varepsilon_{ij}^e = \Delta \varepsilon_{ij}^{eD} + \Delta \varepsilon_{ij}^{eT} + \Delta \varepsilon_{ij}^{eV} \quad (43)$$

と表すことができ、それぞれ、

$$\Delta \varepsilon_{ij}^{eD} = \left(\frac{1+\nu_B}{E_B} - \frac{1+\nu_A}{E_A} \right) \sigma_{ij} - \left(\frac{\nu_B}{E_B} - \frac{\nu_A}{E_A} \right) \sigma_{kk} \delta_{ij} \quad (44)$$

$$\Delta \varepsilon_{ij}^{eT} = (\alpha_B - \alpha_A) (T - T_0) \delta_{ij} \quad (45)$$

$$\Delta \varepsilon_{ij}^{eV} = \beta \delta_{ij} \quad (46)$$

と表される。ただし、変態線膨張率 β は、変態による体積膨張率 $(V_B - V_A)/V_A$ を線膨張率に換算した値であり、

$$\beta \simeq (V_B - V_A)/(3V_A) = -(\rho_B - \rho_A)/(3\rho_B) \quad (47)$$

と表される。

以上を用いると、弾性ひずみは、

$$\varepsilon_{ij}^e = \frac{1+\bar{\nu}}{\bar{E}} \sigma_{ij} - \frac{\bar{\nu}}{\bar{E}} \sigma_{kk} \delta_{ij} + \bar{\alpha} (T - T_0) \delta_{ij} + \beta p(\phi) \delta_{ij} \quad (48)$$

と表される。ただし、 $\bar{E}, \bar{\nu}$ および $\bar{\alpha}$ はそれぞれ、

$$\bar{E} = \frac{1}{(1-p(\phi))/E_A + p(\phi)/E_B} \quad (49)$$

$$\bar{\nu} = \frac{(1-p(\phi))\nu_A/E_A + p(\phi)\nu_B/E_B}{(1-p(\phi))/E_A + p(\phi)/E_B} \quad (50)$$

$$\bar{\alpha} = (1-p(\phi))\alpha_A + p(\phi)\alpha_B \quad (51)$$

である。また、式 (48) を時間微分すると、弾性ひずみの速度式として、

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^e = \frac{1+\bar{\nu}}{\bar{E}} \dot{\sigma}_{ij} - \frac{\bar{\nu}}{\bar{E}} \dot{\sigma}_{kk} \delta_{ij} + \bar{\alpha} \dot{T} \delta_{ij} + \beta p'(\phi) \dot{\phi} \delta_{ij} \quad (52)$$

が得られる。ただし、 $p'(\phi) = dp(\phi)/d\phi$ である。

3.1.2 塑性ひずみ

次に、塑性ひずみについて考える。ただし、塑性則に関する詳細な議論はここでは省略し、一般的な最小限の表現にとどめることとする。いま、降伏関数の内部変数⁽⁴⁾に ϕ を加えると、一般に降伏関数 F は $F(\sigma_{ij}, \varepsilon_{ij}^p, a_{ij}, \kappa, T, \phi)$ として定義できる。ただし、 a_{ij} は背応力、 κ は加工硬化パラメータである。このとき、塑性状態にあるときには次式が成り立つ。

$$F(\sigma_{ij}, \varepsilon_{ij}^p, a_{ij}, \kappa, T, \phi) = 0 \quad (53)$$

ここで、Prager の適合条件から、塑性変形中は応力点が降伏曲面上に存在しなければならないので、降伏関数について次式が成立している必要がある。

$$\dot{F} = \frac{\partial F}{\partial \sigma_{ij}} \dot{\sigma}_{ij} + \frac{\partial F}{\partial T} \dot{T} + \frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{ij}^p} \dot{\varepsilon}_{ij}^p + \frac{\partial F}{\partial a_{ij}} \dot{a}_{ij} + \frac{\partial F}{\partial \kappa} \dot{\kappa} + \frac{\partial F}{\partial \phi} \dot{\phi} = 0 \quad (54)$$

ここに、従来の塑性力学理論に従って、移動硬化則、法線則、および加工硬化パラメータについて、

$$\dot{a}_{ij} = C \dot{\varepsilon}_{ij}^p \quad (55)$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = \Lambda \frac{\partial F}{\partial \sigma_{ij}} \quad (56)$$

$$\dot{\kappa} = \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}^p \quad (57)$$

を与え、整理すると、塑性ひずみ速度は次のように表すことができる。

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = \hat{G} \left(\frac{\partial F}{\partial \sigma_{pq}} \dot{\sigma}_{pq} + \frac{\partial F}{\partial T} \dot{T} + \frac{\partial F}{\partial \phi} \dot{\phi} \right) \frac{\partial F}{\partial \sigma_{ij}} \quad (58)$$

ただし、 \hat{G} については、

$$\frac{1}{\hat{G}} = - \left(\frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{mn}^p} + \frac{\partial F}{\partial \kappa} \sigma_{mn} + C \frac{\partial F}{\partial a_{ij}} \right) \frac{\partial F}{\partial \sigma_{mn}} \quad (59)$$

である。

このように、一般には、降伏関数を ϕ に依存する形式で与えることができる。 ϕ を含まない降伏関数としては、例えば Mises の降伏関数

$$F = \frac{1}{2} s_{ij}^* s_{ij}^* - \frac{1}{3} \sigma_0^2 \quad (60)$$

が用いられる。ただし、 σ_0 は初期降伏応力、 s_{ij} は偏差応力、 s_{ij}^* は s_{ij} から背応力 a_{ij} の偏差成分を差し引いたものであり、次式で与えられる。

$$s_{ij}^* = s_{ij} - \left(a_{ij} - \frac{1}{3} a_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (61)$$

このような場合、例えば降伏応力を ϕ に依存するようにして、降伏関数に ϕ の依存性を導入することが考えられる。

3.2 フェーズフィールド方程式 次に、フェーズフィールド方程式の具体的な形を導出する。前節で導かれた式(19)に、式(34)で定めた Gibbs の自由エネルギー密度を代入すると、

$$\tau \dot{\phi} = \epsilon_g^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_i} - \frac{1}{\rho} [p'(\phi)(\rho_B g_B - \rho_A g_A) + w_g d'(\phi)] \quad (62)$$

が得られる。ただし、 $d'(\phi) = dd(\phi)/d\phi$ である。ここで、変態潜熱 $L(T)$ とは、相 A から相 B に変態するときに発生する熱量であるから、エントロピー密度との間には、

$$L(T) = T(\rho_B \eta_B - \rho_A \eta_A) \quad (63)$$

という関係がある。この式と式(25)を用いると、次の関係が得られる。

$$\begin{aligned} & \rho_B g_B - \rho_A g_A \\ &= - \int_0^T (\rho_B \eta_B - \rho_A \eta_A) dT + \int_{\sigma_{ij}^0}^{\sigma_{ij}} (\epsilon_{bij}^e - \epsilon_{\lambda ij}^e) d\sigma_{ij} \\ &= -T \int_{T_m}^T \frac{L(T)}{T^2} dT + \int_{\sigma_{ij}^0}^{\sigma_{ij}} \Delta \epsilon_{ij}^e d\sigma_{ij} \end{aligned} \quad (64)$$

ただし、 T_m および σ_{ij}^0 は、平衡変態温度および初期応力を表す。ここで、式(64)の右辺第1項は相変態に対する温度の影響を表す項となり、右辺第2項は相変態に対する応力と弾性ひずみの影響を表す項として考えることができる。また、右辺第2項は、式(43)-(46)を用いると、応力 σ_{ij} の関数 $f(\sigma_{ij})$ として、次のように表すことができる。

$$\begin{aligned} f(\sigma_{ij}) &= \int_{\sigma_{ij}^0}^{\sigma_{ij}} [\Delta \epsilon_{ij}^{eD} + \Delta \epsilon_{ij}^{eT} + \Delta \epsilon_{ij}^{eV}] d\sigma_{ij} \\ &= n_1 \sigma_{kk} + n_2 \sigma_{ij} \sigma_{ij} \end{aligned} \quad (65)$$

ただし、 n_1 および n_2 は、材料定数によって決定される係数である。これは、変態による材料定数の変化や体積変化が変態の進行に影響を与えることを表している。さらに簡単のため、変態潜熱 $L(T)$ は温度によらず一定であるとし、 $L(T) = L_0$ とすると、式(64)から、フェーズフィールド方程式(62)は、

$$\begin{aligned} \tau \dot{\phi} &= \epsilon_g^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_i} - \frac{1}{\rho} w_g d'(\phi) \\ &\quad - \frac{1}{\rho} p'(\phi) \left[L_0 \left(\frac{T_m - T}{T_m} \right) + f(\sigma_{ij}) \right] \end{aligned} \quad (66)$$

として表すことができる。

3.3 熱伝導方程式 最後に、式(10)で求めたエネルギー保存則から、熱伝導方程式を導出する。いま、弾性変形は可逆過程であるので、その熱力学的性質から内部エネルギー u の時間変化量 \dot{u} は、

$$\dot{u} = T \dot{\eta} + \frac{1}{\rho} \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}^e \quad (67)$$

として表される。したがって、式(10)および式(67)を用いると、熱伝導方程式として次の形が得られる。

$$\rho T \dot{\eta} + \frac{\partial h_i}{\partial x_i} - \rho \epsilon_u^2 \dot{\phi} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_i} - \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}^p = 0 \quad (68)$$

ただし、ここでは簡単のため、塑性仕事はすべて熱に変わるものとする。ここに、式(32)、(36)で定めたエントロピー密度を代入し、熱流束ベクトル h_i に対して式(24)を適用すると、

$$\begin{aligned} & [(1-p(\phi))\rho_A c_A + p(\phi)\rho_B c_B] \dot{T} - k \frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_i} \\ & + \left[p'(\phi)T(\rho_B \eta_B - \rho_A \eta_A) - \rho \epsilon_u^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_i} + T w_\eta d'(\phi) \right] \dot{\phi} \\ & + T \left[\frac{\partial \epsilon_{\lambda ij}^e}{\partial T} + p(\phi) \left(\frac{\partial \epsilon_{bij}^e}{\partial T} - \frac{\partial \epsilon_{\lambda ij}^e}{\partial T} \right) \right] \dot{\sigma}_{ij} - \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}^p = 0 \end{aligned} \quad (69)$$

となる。ここで、式(63)で示した潜熱 $L(T)$ 、全体の熱容量 $\rho c = (1-p(\phi))\rho_A c_A + p(\phi)\rho_B c_B$ および弾性ひずみ ϵ_{ij}^e を用いると、結局、次の熱伝導方程式が得られる。

$$\begin{aligned} \rho c \dot{T} &= k \frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_i} - T \frac{\partial \epsilon_{ij}^e}{\partial T} \dot{\sigma}_{ij} + \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}^p \\ &\quad - \left[p'(\phi)L(T) - \rho \epsilon_u^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_i} + T w_\eta d'(\phi) \right] \dot{\phi} \end{aligned} \quad (70)$$

ただし、この式の右辺第2項は弾性変形によって生じる発熱の影響、第3項は塑性ひずみによる仕事は温度場に与える影響、第4項は変態が生じる際の変態潜熱の影響をそれぞれ表している。

4. 結 言

フェーズフィールドモデルを用いた変態-熱-力学の連成解析のための基礎式の導出を行った。その結果、フェーズフィールド方程式(66)、熱伝導方程式(71)および弾性ひずみ式(48)、塑性ひずみ式(58)が得られた。この基礎式に基づき、有限要素法などによる数値解析を行うことによって、従来の連続体力学および体積分率に基づく連成解析ではできなかった、2相界面の成長問題への適用が可能となり、デンドライト組織などの複雑な組織形成や、結晶粒成長、多結晶形成過程における応力変化および残留応力に関する数値解析が可能となった。

ここで対象としたモデルは、結晶粒内では連続的な取り扱いができるような、やや大きなスケールを想定している。したがって、塑性現象に関して、より詳細な検討を行うためには、転位やすべりといった原子スケールの現象を考慮したモデル化を行う必要がある。核生成に関しては、Lanらが結晶塑性論によってひずみエネルギー分布を求め、それに基づいた核生成頻度

を与えて、セルオートマトンによって結晶成長の計算を行う手法を提案しており⁽¹⁸⁾、結晶塑性などの理論と、本研究のモデルとリンクさせることによって、粒界や粒内の応力についてのより詳細な解析を行うことが期待できる。

最後に、本研究に関して有意義な助言を頂いた福山大学 井上達雄教授に謝意を表す。

文 献

- (1) Uehara, T. and Tsujino, T., Simulations on the Stress Evolution and Residual Stress in Precipitated Phase by using the Phase Field Model, *Nihon Kikai Gakkai Ronbunshu, A (Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A)*, submitted (in Japanese).
- (2) Inoue, T. et al., Description of Transformation Kinetics, Heat Conduction and Elastic-plastic Stresses in the Course of Quenching and Tempering of some Steels, *Ingenieur Archiv*, **50-5** (1981), 315-332.
- (3) The Japan Society of Mechanical Engineers ed., *Thermomechanical Behavior of Materials During Transformation*, (1991), Corona-sha (in Japanese).
- (4) Inoue, T., Tanaka, K., Nagaki, S., *Solid Mechanics and Analysis of Phase Transformation*, (1995), Taiga Syuppan (in Japanese).
- (5) Caginalp, G. and Fire, P., Phase-field Methods for Interfacial Boundaries, *Physical Review, B*, **33-11** (1986), 7792-7794.
- (6) Kobayashi, R., Modeling and Numerical Simulations of Dendritic Crystal Growth, *Physica D*, **63** (1993), 410-423.
- (7) Wang, S.-L. et al., Thermodynamically-Consistent Phase-Field Models for Solidification, *Physica D*, **69** (1993), 189-200.
- (8) Karma, A. and Rappel, W. J., Quantitative Phase-Field Modeling of Dendritic Growth in Two and Three Dimensions, *Physical Review, E*, **57-4** (1998), 4323-4349.
- (9) Uehara, T., and Sekerka, R. F., Phase Field Simulations of Faceted Growth for Strong Anisotropy of Kinetic Coefficient, *Journal of Crystal Growth*, **254** (2003), 251-264.
- (10) Kobayashi, R., Warren, J. A., Carter, W. C., Vector-valued Phase Field Model for Crystallization and Grain Boundary Formation, *Physica D*, **119** (1998), 415-423.
- (11) Warren, J. A. et al., Extending Phase Field Models of Solidification to Polycrystalline Materials, *Acta Materialia*, **51** (2003), 6035-6058.
- (12) Fan, D. and Chen, L.-Q., Computer Simulation of Grain Growth using a Continuum Field Model, *Acta Materialia*, **45-2** (1997), 611-622.
- (13) Kassner, K. and Misbah, C., A phase-Field Approach for Stress-Induced Instabilities, *Europhysics Letters*, **46** (1999), 217-223.
- (14) Koyama, T. et al., Computer Simulation of the Microstructure Changes Based on the Phase-Field Method, *Materia Japan*, **38-8** (1999), 624-628 (in Japanese).
- (15) Artemev, A., Wang, Y., Khachatryan, A. G., Three-dimensional Phase Field Model and Simulation of Martensitic Transformation in Multilayer Systems under Applied Stresses, *Acta Materialia*, **48** (2000), 2503-2518.
- (16) Uehara, T. and Tsujino, T., Phase Field Simulation of Stress Evolution during Solidification, *Journal of Crystal Growth*, **275-1/2** (2005), 219-224.
- (17) Sekerka, R. F., Fundamentals of Phase Field Theory, *Advances in Crystal Growth Research*, ed. by K. Sato, Y. Furukawa and K. Nakajima (1999), Elsevier, 21-41.
- (18) Lan, Y. J. et al., Mesoscale Simulation of Deformed Austenite Decomposition into Ferrite by Coupling a Cellular Automaton Method with a Crystal Plasticity Finite Element Model, *Acta Materialia*, **53** (2005), 991-1003.